

Contractualisation vague A 2007-2010

**Dossier de demande de reconnaissance
d'une unité de recherche auprès du ministère
et éventuellement d'association à un EPST ou EPIC**

Identification, moyens, dossier scientifique

***Laboratoire de Physique et Modélisation
des Milieux Condensés
(UMR 5493)***

Frank Hekking

DS2

CNRS - Université Joseph Fourier

Novembre 2005

Date et signature du responsable de la demande :

Partie à remplir par le responsable de ou des établissement(s) demandeur(s) :

Je donne mon accord à la présente demande :

de reconnaissance par le ministère

. d'association à l'EPST ou EPIC (préciser) :

d'une unité de recherche dans le cadre des dispositions générales et spécifiques au statut de l'unité.

Sous réserve de l'accord de la direction de la recherche et du directeur général de l'EPST ou de l'EPIC concerné, la direction de l'unité serait assurée par :

M Thierry DOMBRE

Nom et prénom du responsable de l'établissement demandeur (**établissement principal**) :

.....

Qualité : Président de l'Université Joseph Fourier

Date :

Signature :

Nom et prénom du responsable de l'établissement demandeur (**établissement secondaire**, le cas échéant) :

.....

Qualité :

Date :

Signature :

Nom et prénom du responsable de l'établissement demandeur (**établissement secondaire**, le cas échéant) :

.....

Qualité :

Date :

Signature :

Sommaire :

I – Structuration et moyens	3
II – Dossier scientifique	21
II.1 Rapport scientifique	21
Avant propos	22
Equipe : auto organisation des Structures complexes	25
Equipe : Théorie des systèmes Mésoscopiques	38
Equipe : Ondes en milieu complexe	49
Informatique	59
II.2 Bilan quantitatif	62
II.3 Déclaration de politique scientifique	76
Avant propos	77
Equipe : Théorie des systèmes Mésoscopiques	82
Equipe : Ondes en milieu complexe	87
Système d'information et aspects numériques	92
III – Formation permanente	93

I - STRUCTURATION et MOYENS

I - Structuration et moyens de l'unité faisant l'objet d'une demande de reconnaissance

I.1 - Caractéristiques de la demande de reconnaissance

Établissement faisant cette demande : Université Joseph Fourier - Grenoble à titre principal
à titre secondaire

Autre(s) établissement(s) présentant également une demande pour la même unité :

..... à titre principal à titre secondaire
..... à titre secondaire

Label demandé

Demande de reconnaissance auprès du ministère	<input type="checkbox"/> EA équipe d'accueil * <input type="checkbox"/> JE jeune équipe * <input type="checkbox"/> Equipe de recherche technologique : <input type="checkbox"/> ERT autonome <input type="checkbox"/> ERT interne (préciser le label demandé et l'intitulé de l'unité de recherche de rattachement) :
Demande d'association à un EPST ou EPIC * (préciser) : CNRS Autre EPST/EPIC concerné :	Label demandé : UMR CNRS/UJF (cf. nomenclature des labels)

* Cocher ici si l'unité présente parallèlement une demande de reconnaissance d'une ERT interne.

Type de demande

nouvelle unité (création « ex-nihilo »)

unité issue d'unité(s) contractualisée(s) (*souligner le type de restructuration*) : renouvellement de l'unité de recherche ; unité issue de l'éclatement d'une ancienne unité reconnue ; fusion de plusieurs unités reconnues ; éclatement-fusion.

Situation antérieure de l'unité

Etablissement principal	Label et n°	Nom du responsable précédent	Intitulé de l'unité	Date de la dernière reconnaissance
Université Joseph Fourier	UMR 5493	F. Hekking, A. Pasturel	LPMMC	2003

Intitulé complet de l'unité

Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés

Responsable

M./Mme	Nom	Prénom	Corps-Grade	Organisme (le cas échéant)	Section du C.N.U. ou de l'organisme
M	Hekking	Frank	PR 2	UJF/Grenoble1	28

J'autorise la diffusion de mon nom sur internet (annuaire des unités de recherche).

Coordonnées officielles de l'unité

- Localisation et établissement : CNRS – Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés
- Numéro, voie : 25, avenue des martyrs
- Boîte postale : B.P. 166
- Code Postal et ville : 38042 Grenoble cedex
- Téléphone : 04 76 88 79 80 Télécopie : 04 76 88 79 83
- Adresse électronique : secr.lpmmc@grenoble.cnrs.fr

Partenaire(s) concerné(s) par la demande (cf. nomenclature)

* Préciser le DS et le secteur disciplinaire principaux et éventuellement secondaires.	Départements Scientifiques MSTP *		Secteurs disciplinaires MSTP *	
	principal	secondaire(s)	principal	secondaire(s)
Ministère	DS2		211 – 221 - 231	
CNRS	Départements Scientifiques CNRS *		Sections du comité national	
	MIPPU		05 – 06	02
INSERM	Commissions scientifiques spécialisées INSERM			
INRA	Départements de recherche INRA			
INRIA				
IRD	Commissions scientifiques sectorielles IRD			
Autre (préciser) :				

Mots-clefs MSTP (cf. nomenclature)

Milieux denses, matériaux et composants
 Constituants élémentaires et physique théorique
 Milieux dilués et optique fondamentale

Mots-clefs libres

Nanophysique
 Ondes

Ecole Doctorale de rattachement (établissement, n°, intitulé)

ED de Physique (UJF), 47

Participation à un programme pluri-formations ou à une structure fédérative (label et n° éventuels, intitulé)

IPMC (Institut de Physique de la Matière Condensée)
 IdNANO (Institut des Nanosciences)

Participation à un Réseau européen (préciser)

SFINX (STREP)
 EuroSQIP (IP)
 CMA (NoE)

I.2 - Moyens matériels et financiers

I.2.1 - Ressources annuelles de l'unité au cours des quatre dernières années (hors financements récurrents du ministère et des EPST ou EPIC)

ORIGINE	Moyenne annuelle des 4 dernières années	Taux de TVA*	Remarques éventuelles sur l'évolution
Reversement BQR et ressources supplémentaires provenant de l'établissement	4000 €		2003-2004 NSF ACI+ATIP
Ressources propres (contrats de recherche, prestations...)	13600 €		
Collectivités territoriales	2000 €		
Communauté européenne	2000 €		
Fonds National pour la Science	4000 €		
Fonds pour la Recherche et la Technologie	27000 €		
Total	52600 €		

* Le cas échéant.

I.2.2 - Budget prévisionnel de l'unité pour le prochain contrat

NATURE DES FINANCEMENTS 2007 (TTC)	Crédits demandés par l'établissement principal (moyenne annuelle)	(préciser éventuellement ci-dessous les crédits demandés par les établissements secondaires)	
Crédits demandés au ministère (direction de la recherche) : - Crédits scientifiques (= fonctionnement et équipement) - Vacances Sous-total ministère	100000 € 100000 € 100000 €		
Crédits demandé à l' EPST ou EPIC de tutelle et éventuellement à d'autres organismes de recherche : - Fonctionnement général (hors infrastructure) - Infrastructure (convention d'hébergement, ...) - Opérations scientifiques - Programmes - Gros équipement Sous-total EPST/EPIC	EPST ou EPIC de tutelle (préciser) : CNRS 40000€ 40000€	Autre EPST/EPIC associé (préciser) :	Autre EPST/EPIC associé (préciser) :
Autres ressources attendues [collectivités, contrats, subventions (autres que collectivités), autres contributions (dons)] y compris CPER			
Total général	140000€		

N.B. :

- Si des financements sont demandés pour l'unité par l'intermédiaire de plusieurs établissements d'enseignement supérieur et de recherche, la **répartition** de ce financement entre les différents établissements partenaires sera mentionnée dans ce tableau.
- Les subventions du ministère chargé de la recherche universitaire versées au titre des **infrastructures** sont globalisées sur l'établissement, on ne les fera pas figurer dans ce tableau. Par contre, les dépenses d'infrastructure supportées par l'EPST/EPIC pour l'hébergement de l'unité seront isolées puisqu'elles sont affectées à une unité.
- Dans le dossier scientifique, la **justification des besoins** doit être présentée, de même qu'éventuellement leur modulation au cours du contrat.

Pour information :

Crédits attendus dans le cadre du CPER		2006 + 2007	Remarques éventuelles
Part Etat	Ministère EPST ou EPIC		
Part Collectivités locales			
Total			

I.2.3 – Liste des achats d'équipements souhaités ou programmés pour le prochain contrat

Descriptif et nombre	Coût unitaire	Source de financement (ministère, EPST ou EPIC à préciser ...) *	Coût total
Jouvences : serveurs de calcul 2007		(D) Hors quadriennal	80000 € HT
Aménagement des locaux		(D) Hors quadriennal	40000 € HT
Jouvences maintenance postes de travail et imprimantes		(D) Quadriennal 2007-2010	30000 € HT
Total			150000 HT

* Préciser si les financements sont demandés (D) ou acquis (A). Faire apparaître les éventuels cofinancements prévus.

La justification des financements demandés au ministère et aux EPST/EPIC pour les achats d'équipements doit être explicitée dans le dossier scientifique.

I.3 - Ressources humaines

I.3.1 - Liste nominative des professeurs des universités et maîtres de conférence (et assimilés), appelés à faire partie de l'unité proposée

(à classer par établissement d'affectation)

Nom	Prénom	Année de naissance (AAAA)	Corps grade (1)	Section CNU (2 chiffres)	HDR (2)	Date d'arrivée dans l'unité (3)	Etablissement d'affectation	Code établissement (4)
HEKKING	Frank	1964	PR2	28	OUI	01/2000	UJF	0381838S
SIMON	Pascal	1970	MCF	28	OUI	01/2003	UJF	0381838S

Récapitulatif	Etablissement principal	Etablissements secondaires (préciser)			Autres établissements	Total
			
Total EC	2					2
dont HDR	2					2

(1) Cf la nomenclature 1 en annexe répertoriant les sigles correspondant aux catégories concernées.

(2) Cocher les cases (X) correspondant aux enseignants-chercheurs habilités à diriger des recherches.

(3) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

(4) Cf le menu déroulant ci-contre ou la nomenclature en annexe

I.3 - Ressources humaines

I.3.3 - Liste nominative des chercheurs statutaires, appelés à faire partie de l'unité proposée (à classer par établissement d'exercice)

Nom	Prénom	Année de naissance (AAAA)	Organisme d'appartenance	Corps grade (1)	Section ou comité d'évaluation de l'organisme (2 chiffres)	HDR (2)	Date d'arrivée dans l'unité (3)	Etablissement (lieu d'exercice) (4)	Code établissement
MINGUZZI	Anna	1973	CNRS	CR2	06		10/2005	UJF/LPMMC	0381838S
PASTUREL	Alain	1954	CNRS	DR1	19	X	09/1990	UJF/LPMMC	0381838S
PISTOLESI	Fabio	1968	CNRS	CR1	06		01/2002	UJF/LPMMC	0381838S
ROSSETTO	Vincent	1975	CNRS	CR2	05		01/2006	UJF/LPMMC	0381838S
SKIPETROV	Sergey	1974	CNRS	CR2	05		10/2001	UJF/LPMMC	0381838S
SCHUCK	Peter	1940	CNRS	DR1	02	X	01/2000	UJF/LPMMC	0381838S
VAN TIGGELEN	Bart	1965	CNRS	DR2	05	X	10/1993	UJF/LPMMC	0381838S
ZIMAN	Tim	1954	CNRS	DR2	02	X	05/2000	Institut Laue Langevin (ILL)	

Récapitulatif	Organismes (préciser)				Total
	CNRS	
Total chercheurs étab. principal (préciser).....	8				8
dont HDR	4				4
Total chercheurs étab. secondaire (préciser).....					
dont HDR					
Total chercheurs étab. secondaire (préciser).....					
dont HDR					
Total chercheurs					
dont HDR					

(1) Cf la nomenclature 1 en annexe répertoriant les sigles correspondant aux catégories concernées.

(2) Cocher les cases (X) correspondant aux chercheurs habilités à diriger des recherches.

(3) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

(4) Préciser l'établissement dans lequel travaille habituellement le chercheur.

I.3 - Ressources humaines

I.3.4 - Liste nominative des autres chercheurs appelés à faire partie de l'unité proposée

(à classer par établissement d'exercice)

Nom	Prénom	Année de naissance (AAAA)	Organisme d'appartenance	Etablissement (lieu d'exercice) (1)	Date d'arrivée dans l'unité (2)

Total

(1) Préciser l'établissement dans lequel travaille habituellement le chercheur.

(2) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

I.3 - Ressources humaines

I.3.5 - Liste nominative des autres personnels enseignants ou chercheurs accueillis à titre temporaire au cours des quatre dernières années (1/10/2001 au 1/10/2005 environ) pour une durée d'au moins 6 mois

Nom Prénom	Année de naissance (AAAA)	Statut (1)	HDR (2)	Institution d'appartenance : MEN, organisme (préciser), secteur privé (préciser)...	Etablissement (lieu d'exercice)	Date d'arrivée dans l'unité (3)	Date de départ de l'unité (3)
CAMPILLO, Michel	1957	PR	X	UJF	LGIT	09/2003	08/2005
JASK, Noël	1966	MCF		Univ. De Metz	LTMC	01/2003	12/2003
JOYE, Alain	1965	PR	X	UJF	Institut Fourier/UJF	09/2005	03/2005

Total 3	dont HDR 2
----------------	------------

- (1) Cf la nomenclature 1 en annexe répertoriant les sigles correspondant aux catégories concernées.
(2) Cocher les cases (X) correspondant aux chercheurs habilités à diriger des recherches.
(3) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

I.3 - Ressources humaines

I.3.8 - Liste des doctorants encadrés dans l'unité de recherche au 01/10/2005

(à classer par DEA ou master d'origine)

Nom Prénom	Année de naissance (AAAA)	Directeur(s) de thèse	Date de début de thèse (1)	Mode de financement (2)	DEA ou master d'origine (3)	ED de rattachement (4)	Etablissement d'inscription
ANACHE, Domitille	1981	TIGGELEN	09/2005	AM	ENS-Lyon	ED Physique, 47, Grenoble	UJF
FERONE, Raffaello	1974	HEKKING	10/2002	MEN	Univ. Naples, Itlaie	ED Physique, 47, Grenoble	UJF
GUPTA, Florence	1982	PASTUREL	10/2005	IRSN	Orsay	ED Chimie, 428, Orsay	Orsay
SALOMEZ, Julien	1979	SIMON	09/2003	MEN	ENS-Lyon	ED Physique, 47, Grenoble	UJF

Total	4
--------------	----------

(1) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

(2) Cf la nomenclature 1 en annexe.

(3) Intitulé et établissement qui a délivré le DEA/le master.

(4) Intitulé, n° et établissement de rattachement de l'ED.

I.3 - Ressources humaines

I.3.9 - Liste des thèses soutenues au cours des quatre dernières années (1/10/2001 au 1/10/2005 environ) (Régime de la loi de 1984 - à classer par ED et DEA ou master d'origine)

Nom Prénom	Directeur(s) de thèse	Date de soutenance (1)	Référence des publications et des brevets (2)	Mode de financement (3)	Etablissement d'inscription	ED de rattachement (4)	DEA ou master d'origine (5)	Situation professionnelle (6)
BIGNON, Guillaume	PISTOLESI, HEKKING	10/2005	ACL77, ACL80, ACT1, ACT4, AP13	AMX	UJF	Physique, UJF	ENS-Lyon	En formation management
INCZE, Andrei	PASTUREL	09/2002	ACL8, ACL11, ACL28	CIFRE/CNRS	UJF	Physique, UJF	ENS-Lyon	Post-doc ETR
Felipe PINHEIRO	TIGGELEN	11/2003	ACL105, ACL106, ACL108, ACL113,	Etranger (Brésil)	UJF	Physique, UJF	Brésil	SUP
RATCHOV, Alexandre	FAURE, HEKKING	07/2005	ACL48	MEN	UJF	Physique, UJF	Physique de la Matière Condensée et du Rayonnement, UJF	PRIVE
ROBERT, Gregory	PASTUREL	10/2003	ACL13, ACL17, ACL18, ACL21, ACL24, ACL25, ACL33	CEA	UJF	Physique, UJF	Univ. Metz	CEA

Total 4

dont thèses avec publications ou brevets avant le 01/10/2005

3

(1) Préciser le mois et l'année (MM/AAAA).

(2) Préciser les références des publications des docteurs, que vous aurez codifiées dans la partie II.2 du dossier scientifique.

(3) Cf la nomenclature 1 en annexe.

(4) Intitulé, n° et établissement de rattachement de l'ED.

(5) Intitulé et établissement qui a délivré le DEA/le master.

(6) Cf la nomenclature en annexe.

I.3 - Ressources humaines

I.3.10 - Composition de l'unité prévue au début du prochain contrat (1er janvier 2007)

Corps	Enseignement supérieur			Organismes de recherche (préciser)			Autres (préciser)		Total	Evolution prévisible au cours du contrat
	Etab. principal	Etab. secondaire(s)	Autres établissements	CNRS		
Professeurs	2								2	
Maîtres de conférences	1								1	
Directeurs de recherche				4					4	
Chargés de recherche				4					4	
Ingénieurs (1)				1					1	
Personnels techniques et administratifs (1)	1								1	
Autres (préciser) (1)										
Total	4			9					13	
Doctorants	3									

(1) Participation à l'unité de recherche en équivalent temps plein.
Personnels titulaires, ou en CDI, ou en CDD supérieur à 6 mois.

I.3 - Ressources humaines

I.3.11 - A titre indicatif : rappel de la composition de l'unité au début du contrat précédent (1er janvier 2003)

Corps	Enseignement supérieur			Organismes de recherche (préciser)			Autres (préciser)	
	Etab. principal	Etab. secondaire(s)	Autres établissements	CNRS
Professeurs	2							
Maîtres de conférences	2							
Directeurs de recherche				3				
Chargés de recherche				4				
Ingénieurs (1)	1							
Personnels techniques et administratifs (1)	1							
Autres (préciser) (1)								
Total	6			7				
Doctorants	6							

(1) | Participation à l'unité de recherche en équivalent temps plein.
 | Personnels titulaires, ou en CDI, ou en CDD supérieur à 6 mois.

I.4 - Etat prévisionnel des surfaces recherche occupées par l'unité dans l'établissement au 1^e

Surface totale SHON*, dégagements compris :	Surfaces gérées par l'établissement (en m2)	Surfaces gérées dans l'établissement par un organisme (préciser) (en m2)			Total
		
Etablissement principal (préciser) 360	320				320
Etablissement secondaire (préciser)					
Etablissement secondaire (préciser)					

* Surface hors œuvre nette. Surface SHON = surface utile x 1,4.

Surface utile : surface d'une pièce mesurée à l'intérieur des murs porteurs et des cloisons.

Surface hors oeuvre nette : surface administrative utilisée lors du dépôt du permis de construire qui correspond surfaces délimitées par les périmètres extérieurs de la surface horizontale de chaque étage clos ou sous-sol ar faite des surfaces non exploitables (balcons, terrasses, volumes non clos).

I.5 - Liste des thèmes de recherche et des équipes internes de l'unité proposée

Choisissez le code établissement :

Si l'unité n'a pas d'équipes internes, noter dans la ligne E0 uniquement les thèmes de recherche de l'unité.

UNIVERSITE GRENOBLE 1

code
9741061K

	Libellé de l'équipe interne (1)	Responsable	Etablissement de rattachement de l'équipe interne	Code Etablissement	Effectifs EC et chercheurs en ETP (2)	Type d'activité (3)	Thèmes de recherche				
							Thème 1	Thème 2	Thème 3	Thème 4	Thème 5
E 0	<i>(ligne à utiliser seulement pour inscrire les thèmes de recherche de l'unité si celle-ci n'a pas d'équipes internes)</i>										
E 1	Théorie des systèmes mésoscopiques	Hekking	UJF/LPMMC	0381838S	6	autres	bruit et transport quantique	information quantique	spintronique	nanomécanique	corrélations et structure électronique
E 2	Ondes en milieux complexes	Tiggelen	UJF/LPMMC	0381838S	5	autres	ondes, diffusion multiple	optique	sismologie	ultrasons	milieux non linéaires
E 3											
E 4											
E 5											
				Total ETP	11						

(1) Sous-composante fonctionnelle correspondant à l'organigramme de l'unité, une ligne par équipe.

(2) Equivalent temps plein. Les enseignants-chercheurs et chercheurs intervenant dans plusieurs équipes internes sont décomptés au prorata des temps respectifs.

(3) Préciser : ERT internes ou autres. Pour les ERT internes, remplir par ailleurs un dossier propre.

II.2.11 - Brevets, certifications d'obtention végétale et logiciels déposés au cours des quatre dernières années

Liste des brevets prioritaires français ou européens (OEB)

Type de dépôt (INPI, OEB) (1)	N° de dépôt	Date de dépôt	Titre du brevet	N° de publication	Date de publication	Déposants (2)	Co-déposants (2)	Licence (nombre)	Inventeurs

Extensions OEB ou PCT (3) des brevets prioritaires français ou européens

Type d'extension (OEB, PCT,)	Pays d'extension (US, JPN, ...)	N° de dépôt du premier dépôt	Titre du brevet	N° de dépôt pour l'extension	Date de dépôt de l'extension	N° de publication de l'extension	Déposants (2)	Co-déposants (2)	Licence (nombre)	Inventeurs

Certificats d'obtention végétale

Date d'obtention	Déposants (2)	Co-déposants (2)	Titre du certificat

N.B : Préciser éventuellement le dépôt de marques.

Logiciels

Date de dépôt	Déposants (2)	Co-déposants (2)	Finalité du logiciel

(1) INPI : Institut National de la Propriété Industrielle ; OEB : Office Européen des Brevets.

(2) Personnes morales : établissement, organisme, entreprise...

(3) Patent Cooperation Treaty.

DOSSIER SCIENTIFIQUE

II.1 – Rapport Scientifique

II-Dossier scientifique

II.1 - Rapport scientifique

Avant-propos

Preamble

Le laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC) a été fondé en 1991 par Roger Maynard et Alain Pasturel. Il répondait à un besoin de renforcer les approches numériques dans un contexte thématique plus large que celui des laboratoires de la matière condensée du polygone Louis Néel. Ce laboratoire a franchi successivement et avec succès toutes les étapes initiatiques : jeune équipe (purement universitaire) de 1991 à 1994, puis équipe postulante (première reconnaissance du CNRS) 95-96, puis UPRES-associé au CNRS en 97-98 et enfin UMR 5493 CNRS-Université Joseph Fourier à partir de 1998.

Personnel

Plusieurs événements ont marqué la vie du laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés (LPMMC-UMR 5493) ces quatre dernières années.

Tout d'abord, depuis le 1^{er} août 2002, Françoise BERTHOUD a pris ses fonctions d'Ingénieur de Recherche au LPMMC. Elle avait réussi un concours interne du CNRS, ce qui a donné lieu à une création d'un poste d'ingénieur de recherche au sein de laboratoire, création qui est une grande satisfaction. Avant sa nomination, Françoise BERTHOUD était ingénieur d'études à l'Université Joseph Fourier. Ses responsabilités comprenaient l'informatique et les moyens de calcul du laboratoire ainsi que les moyens informatiques de l'Ecole Doctorale de Physique, situés dans la Maison des Magistères. Sa nomination en tant qu'ingénieur de recherche lui permet de s'investir davantage dans ses actions au laboratoire, notamment à travers le projet scientifique de calcul numérique CIMENT. Elle est très active dans le développement de plusieurs missions d'intérêt général à travers des réseaux d'informaticiens, comme le réseau SARI (régional) et la fédération de réseau RESINFO (national). La description des moyens informatiques d'une part, et les actions de Françoise Berthoud d'autre part seront développées avec plus de détails ci-dessous.

Nous mentionnons ensuite l'arrivée de Pascal SIMON, recruté à l'Université Joseph Fourier comme maître de conférences en 28^{ème} section à partir du 1^{er} janvier 2003. Il a amené avec lui une problématique très intéressante autour des « effets Kondo dans les nanostructures ». Son arrivée correspondait à une demande forte de la communauté grenobloise des théoriciens, amplifiée par l'Institut de Physique de la Matière Condensée. Il s'est naturellement intégré dans l'équipe « physique théorique des systèmes mésoscopiques », dirigée par Frank HEKKING. Les relations de Pascal SIMON avec les collègues grenoblois intéressés par l'effet Kondo sont excellentes : il a activement participé à la mise en place d'un projet de recherche de l'Institut de Physique de la Matière Condensée (IPMC) de Grenoble. Ce projet important regroupe expérimentateurs et théoriciens de plusieurs laboratoires et a été financé par l'IPMC.

Le troisième fait essentiel est l'arrivée cet automne de deux chargés de recherche (CR), Anna MINGUZZI (CR2 en commission 06) et Vincent ROSSETTO (CR2 en commission 05). Par ces embauches, notre tutelle CNRS a exprimé un soutien fort pour notre laboratoire et les activités de recherche développées en son sein. L'intégration de ces jeunes personnalités scientifiques dans les grands thèmes du laboratoire se fera sans aucun problème, du fait des liens déjà existants. Leurs projets de recherche sont naturellement présentés dans la section II.3 ci-dessous.

Deux de nos collègues enseignants-chercheurs, Frédéric FAURE et Philippe PEYLA, ainsi qu'un chercheur CNRS, Olivier LEBACQ ont quitté notre unité. Leur évolution scientifique pendant les dernières années les a menés à intégrer respectivement l'institut Fourier des mathématiques, le Laboratoire de Spectrométrie Physique, et le LTPCM où ils poursuivront leurs activités de recherche dans un environnement plus adapté à leurs intérêts scientifiques.

Quatre thèses ont été soutenues lors de ce quadriennal ; une cinquième soutenance est prévue début 2006. Les jeunes docteurs ont tous trouvé un travail (en tant que post-doc, dans un établissement ou dans le privé).

Nous sommes très heureux que Roger MAYNARD, professeur à l'Université Joseph Fourier (UJF) et co-fondateur du LPMMC, ait obtenu le statut de professeur émérite de l'université Joseph Fourier. Ce statut lui permet en particulier d'exercer la fonction de président de la Société Française de Physique (SFP), fonction très importante lors de cette année mondiale de la physique. Du fait de son expérience tant au niveau local que national, la présence de Roger Maynard en tant que professeur émérite est un atout pour le laboratoire.

Mentionnons également le passage CR-DR2 de Bart van TIGGELEN ainsi que le rattachement officiel au LPMMC pour 1/3 de son temps de Peter SCHUCK. Ce dernier est aussi attaché au laboratoire IPN (IN2P3) à Orsay.

Finalement, nous sommes fiers des distinctions qui ont été accordées à trois membres du laboratoire : le *Prix Anatole et Suzanne Abragam 2002* par l'Académie des Sciences de France à Bart van TIGGELEN, la nomination en 2002 de Frank HEKKING en tant que membre junior de l'Institut Universitaire de France (IUF), et la médaille

d'argent du CNRS, accordée à M. CAMPILLO, qui a travaillé au sein de notre unité 2003-2004 avec une délégation au CNRS.

Dossier scientifique

Le bilan scientifique du laboratoire est présenté plus en détail ci-après et s'articule autour de l'activité menée au sein des 3 équipes « auto-organisation des structures complexes », « théorie des systèmes mésoscopiques » et « ondes en milieu complexe ». Pour ces trois grands thèmes, nous avons fait un bref résumé qui doit permettre de comprendre l'état d'esprit de nos recherches :

1. Auto-organisation des structures complexes.

L'évolution de nos recherches au cours de ces deux dernières années s'articule autour de grands thèmes de recherche qui valorisent nos approches numériques tout en assurant un développement permanent de ces méthodes. Nous sommes toujours impliqués dans la compréhension de la stabilité de systèmes plus ou moins complexes, allant de nanostructures à des alliages métalliques à fort potentiel industriel. Les évolutions structurales en fonction des paramètres température ou pression sont pris en compte. Nous focalisons notre attention sur les effets de dimensionnalité. Les aspects cinétiques sont également abordés comme la nucléation et croissance ou bien encore l'auto-organisation de la matière. Les thèmes de recherche qui ont été développés au cours de ces quatre dernières années concernent principalement la relation stabilité structurale-propriétés pour des familles d'oxydes, la mise en œuvre d'Hamiltoniens modèles à partir de calculs *ab initio* et le développement d'un code de dynamique moléculaire *ab initio* qui a permis d'aborder les propriétés de liquides surfondus. A moyen terme, ce code de dynamique moléculaire *ab initio* doit aussi nous servir à construire des potentiels interatomiques le plus transférables possible ('on the fly').

2. Théorie des systèmes mésoscopiques. Les systèmes mésoscopiques sont caractérisés par la propagation cohérente des électrons sur de grandes distances. Par conséquent, il faut tenir compte des effets d'interférences quantiques. En outre, la manière dont se manifestent les interactions entre électrons (répulsives ou attractives) dépend crucialement du système en question. Une partie importante de nos activités de recherche est dédiée aux phénomènes de transport et de bruit afin de mieux comprendre ces effets conjugués de la cohérence de phase et des interactions. Un deuxième volet important concerne les propriétés physiques des circuits quantiques supraconducteurs, basés sur les nanojonctions tunnel Josephson. Ces circuits sont considérés comme un candidat possible d'un *bit quantique*, concept de base pour l'information quantique. On étudie notamment la dynamique des états quantiques dans ces circuits. Nous étudions également la physique associée à la mesure quantique ainsi que les phénomènes de décohérence, qui limitent à présent les fonctionnalités de ces systèmes. Finalement, mentionnons nos efforts récents dans le domaine de la nano-électromécanique, où il s'agit de comprendre le couplage entre les degrés de liberté mécanique et électrique sur l'échelle nanométrique. Il s'agit d'un thème nouveau et très porteur en ce moment, dont les perspectives expérimentales sont très excitantes.

3. Ondes en milieu complexe.

Ces dernières années, un renouveau des concepts de base de la diffusion multiple des ondes, aussi bien électroniques, optiques ou micro-ondes, qu'ultrasonores, ou sismiques, a été initié et développé par l'équipe, avec un esprit très interdisciplinaire et des collaborations locales, nationales et internationales. Coté thématique il s'agit de l'étude mésoscopique dans des systèmes hétérogènes en rajoutant des complexités telles que la rotation Faraday, la chiralité, la magnéto-chiralité, la nonlinéarité, l'anisotropie, ou les complexités structurelles des milieux « naturels », comme par exemple les milieux biologiques ou sismiques, et les gels. Enfin les matériaux « artificiels » ont été étudiés, qu'ils soient très désordonnés ou périodiques. On a toujours cherché à trouver un bon équilibre entre les concepts fondamentaux et les besoins réclamés par les applications existantes ou potentielles. Coté fondamentale on a étudié la localisation forte d'Anderson, l'entropie de Shannon, les corrélations mésoscopiques de très longue portée, la rétrodiffusion cohérente, les instabilités en milieu nonlinéaire et désordonné, le comportement mésoscopique de la chaleur spécifique en supraconductivité, l'équipartition en espace de phase et la statistique de phase. Coté plus appliqué nos occupations s'orientaient vers l'imagerie médicale, l'imagerie sismique sans source, la spectroscopie des ondes diffuses, la rhéologie, le retournement temporel, la quantité de mouvement du vide, et le transfert de l'information en milieu désordonné.

Locaux

Depuis 2001, année de recrutement de trois de nos chercheurs CNRS, le LPMMC rencontre une difficulté dans son implantation à la Maison des Magistères Jean Perrin. Les locaux actuels sont trop exigus pour les 13 permanents avec leur cortège de stagiaires, de doctorants, de post doctorants et de visiteurs. Nous avons réalisé plusieurs opérations afin d'augmenter le nombre de postes de travail :

- Nous avons aménagé une pièce borgne en salle informatique afin de libérer l'ancienne salle informatique qui a été aménagée en bureaux paysagers pour l'accueil des doctorants, post doctorants etc.
- Afin de résoudre le problème récurrent de m2 pour nos stagiaires, nous avons fait une demande auprès de l'UFR de physique. Ainsi, depuis mars 2005, le LPMMC dispose d'une salle de cours d'environ 36 m² située dans la maison des magistères Jean Perrin, pour y héberger des stagiaires.

- Nous aménageons actuellement nos plus grands bureaux pour y héberger deux chercheurs au lieu d'un seul. Cependant, la surface optimale pour notre laboratoire serait plutôt de 400 m² (au lieu des 340 m² à l'heure actuelle). Nous souhaitons éventuellement résoudre ce problème de manque d'espace dans le cadre de la création d'un espace commun pour les théoriciens à Grenoble. Ce projet, intitulé « projet pôle de physique théorique » est piloté par le LPMMC avec le soutien de nos tutelles, le CNRS et l'Université Joseph Fourier. Plus de détails sur ce projet sont donnés au chapitre II.3.

Actions de formation

Les membres du LPMMC sont tous fortement impliqués dans des actions de formation. Tout d'abord, nous accueillons chaque année entre cinq et une petite dizaine de stagiaires (niveaux MASTER 1 et 2) au sein des différentes équipes du laboratoire. Les chercheurs et enseignants chercheurs participent de façon régulière en tant que professeur de cours à des écoles thématiques, le plus souvent organisées dans le cadre de l'école doctorale ou des réseaux (GDR ou européens) auxquels ils appartiennent. Nous mentionnons également plusieurs écoles internationales organisées par des membres du laboratoire pendant ces dernières années en France (Cargèse, Grenoble, Les Houches), en Italie (Trieste) et en Finlande (Kilpisjärvi). Bart van Tiggelen est chargé de cours à l'ENS Lyon, ainsi qu'à l'UJF. Finalement, Françoise Berthoud était responsable d'une formation en sécurité informatique (3 années). Elle assure également des formations en calcul scientifique (introduction au calcul parallèle). Ces dernières formations se déroulent dans le cadre du réseau CIMENT et s'adressent aux étudiants de l'école doctorale, de Master2, ainsi qu'aux chercheurs et personnels techniques (écoles d'automne, FP CNRS).

Aspects numériques

Le LPMMC est moteur dans le développement du pôle phynum (pôle du projet CIMENT à destination des physiciens de la matière condensée et de la matière molle). Ce projet fédère les numériciens des laboratoires suivants : LTPCM, LEPES, LSP et LPMMC. Les responsables scientifiques et techniques du projet sont tous deux issus du LPMMC. La puissance de calcul disponible dans ce cadre est actuellement de 80 processeurs 32 bits (cluster bi-athlon) et de 32 processeurs 64 bits (altix – SGI). Cette puissance de calcul partagée partiellement avec les biologistes, est à l'origine de plus d'une quarantaine d'articles. Nous soulignons que l'existence et la dynamique de ce projet a conduit notre laboratoire à s'impliquer dans le projet CIGRI (Grille de Calcul Grenobloise). Ce projet est plus précisément décrit dans la partie D du présent document.

A. Auto-organisation des structures complexes 2002-2005

Chercheurs:

Olivier Lebacq (CR)
Alain Pasturel (DR)
Philippe Peyla (MCF)
Andrei Incze (thésard)
Gregory Robert (thésard)

Visiteurs :

Noël Jakse (Univ. de Metz, en délégation au CNRS)

Préambule :

Avec le départ de deux permanents sur trois, il a semblé important de montrer que la thématique de cette équipe est une thématique d'avenir même si cette équipe n'en a plus au sein du LPM2C. La présentation faite ci-dessous ne se situe pas au niveau des principes et des équations de la thermodynamique qui sont bien connus (au même titre que les équations de la mécanique, ou autres ...) mais dans sa mise en oeuvre qui fait le plus souvent appel à la paramétrisation ou à un support expérimental.

La démarche adoptée dans cette équipe depuis une dizaine d'années est de montrer que la thermodynamique dans son application et ses potentialités est en pleine évolution grâce à

(i) l'apport des calculs ab initio qui vont permettre de calculer l'énergie d'un système de manière très précise.

(ii) l'efficacité accrue des algorithmes de type dynamique moléculaire et Monte Carlo qui donne accès aux grandeurs thermodynamiques à partir de l'exploration de l'espace des phases

En prenant en compte que les calculs ab initio fournissent non seulement l'énergie de cohésion d'un système (via les théorèmes de Hohenberg et Kohn pour la théorie de la fonctionnelle de la densité) mais aussi les forces interatomiques (théorème de Hellmann et Feynman), il y a quatre types d'études possibles :

- Les calculs sur une structure statique souvent la structure cristallographique expérimentale. Dans ce cas l'énergie seule du système est déterminée. A partir de l'analyse de la structure électronique, les propriétés magnétiques, optiques, de conduction, peuvent être étudiées. Le critère de stabilité de phases le plus souvent utilisée est la position du niveau de Fermi dans un minimum de densité d'états.

- Les calculs de relaxation statique pour lesquels la détermination des forces est requise : elles permettent d'explorer l'espace des configurations autour d'un minimum local. On peut ainsi définir l'énergie d'une structure cristalline « idéale »

- Les calculs des forces peuvent conduire à la mise en oeuvre de simulations de type dynamique moléculaire (ab initio dans le cas présent). Dans ce cas, les grandeurs thermodynamiques deviennent accessibles à partir de l'exploration déterministe de l'espace des phases.

- Finalement, les simulations de type Monte Carlo permettent également d'accéder aux grandeurs thermodynamiques à partir de la seule connaissance de l'énergie. Dans ce cas, les trajectoires dans l'espace des phases sont de caractère stochastique.

Concernant les deux premiers points, la possibilité de calculer des énergies de formation de matériaux tels que céramiques, alliages métalliques ou semiconducteurs à partir de la théorie de la fonctionnelle de la densité n'est plus à prouver : c'est devenu un champ de recherche mature avec des logiciels académiques très performants (VASP, CASTEP, AB INIT, SIESTA, ...). Cette activité se positionne maintenant comme un complément indispensable à la recherche expérimentale grâce à leur précision et à l'analyse du mécanisme de formation des liaisons chimiques et de la structure électronique. Ce type de calculs donne accès aussi à l'étude des transitions de phases sous pression et/ou sous déformation élastique. Nous aborderons quelques exemples dans les applications comme l'étude des chemins de Bain en métallurgie physique ou les transitions de phases sous pression dans les oxydes liées le plus souvent au réarrangement ou à la déformation des octaèdres ou tétraèdres qui sont les entités structurales de base dans ces matériaux.

Du point de vue de la thermodynamique, les deux derniers points sont certainement les plus intéressants mais aussi les plus difficiles à traiter dans l'environnement des calculs ab initio. La mécanique statistique nous permet de relier l'énergie de Helmholtz (la moins difficile à obtenir par un calcul ab initio) à la fonction de partition :

$$F = -kT \log Z$$

Où la fonction de partition se déduit de tous les arrangements possibles du système compatible avec la phase adoptée.

L'alternative est d'utiliser les lois thermodynamiques et de calculer l'entropie par intégration de la chaleur spécifique le long d'un isochoire (le plus facile pour un calcul de structure électronique).

$$S(T, V) = \int_0^T \frac{1}{T} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V dT$$

Sans entrer dans les détails, le problème pratique de ce type de calculs est d'échantillonner l'espace des phases le plus efficacement possible, c'est-à-dire avoir un nombre suffisant de microétats non corrélés du système pour déterminer le plus précisément possible les grandeurs thermodynamiques. Dans le cas des calculs ab initio, le plus efficace possible signifie le minimum de calculs de structure électronique (qui est le facteur limitant en temps calcul de la simulation); cela aboutit à une limitation du nombre de microétats visités avec l'infrastructure informatique actuelle qui rend quasi impossible une détermination correcte des grandeurs thermodynamiques.

Il y a alors deux grandes manières de procéder :

-soit utiliser des hamiltoniens modèles :

Modèles d'Ising ou d'Heisenberg pour l'étude des mises en ordre chimique ou magnétique

Modèles à la Landau pour décrire les transitions de phases liées à un ou des modes particuliers de phonons.

Modèle quasiharmonique

Modèles issus de la théorie de l'élasticité des milieux continus

Autres

Dans ce cas l'enjeu est dériver les paramètres de ces hamiltoniens modèles à partir des calculs ab initio. Il est aussi pour les modèles d'Ising et d'Heisenberg par exemple de déterminer la portée de ces hamiltoniens (nombre d'interactions).

Il est évident que le choix de l'hamiltonien modèle se fait à partir de l'analyse des mécanismes qui régissent la transition de phases.

-soit paramétriser l'énergie ou l'énergie libre :

L'idée est de choisir une fonctionnelle pour la grandeur considérée et de déterminer les paramètres de cette fonctionnelle à partir de calculs ab initio. D'un point de vue conceptuel, cette démarche n'a pas plus de valeur que celle largement utilisée depuis 30 ans en thermodynamique et qui est d'obtenir ces paramètres à partir de données expérimentales.

La faiblesse de ce type d'approches est le manque de transférabilité des fonctionnelles et donc un manque de caractère prédictif.

Bien entendu, la réflexion doit se porter sur la forme de la fonctionnelle :

Les logiciels de thermodynamique classique (Calphad) utilisent un développement des grandeurs thermodynamiques sous forme polynomiale (fonction de T, composition, V ou T, composition, P) sans aucune assise théorique. Nous montrerons que dans des cas particuliers, il est possible de construire une fonctionnelle de type Calphad à partir des calculs ab initio. C'est un challenge très important pour les applications industrielles.

La fonctionnelle énergie peut être plus ou moins bien construite sur des bases de calcul de structure électronique mais sans avoir la sophistication des calculs ab initio. Cela peut être obtenu par une réduction de la base des orbitales (liaisons fortes) et une description sommaire de la densité d'états (deuxième ou quatrième moment), par une forme analytique de la densité de charge (EAM), ou encore la dérivation de potentiels de paire effectifs à partir d'une théorie de perturbation. Le prix à payer est une transférabilité réduite qui peut être en partie résolue par une approche qui reparamétrise les forces empiriques par des calculs ab initio au cours de la simulation (technique dite 'on the fly').

Les thèmes de recherche qui ont été développés au cours de ces quatre dernières années concernent principalement la relation stabilité structurale-propriétés pour des familles d'oxydes, la mise en œuvre d'Hamiltoniens modèles à partir de calculs ab initio et le développement d'un code de dynamique moléculaire ab initio qui a permis d'aborder les propriétés de liquides surfondus. A moyen terme, ce code de dynamique moléculaire ab initio doit aussi nous servir à construire des potentiels interatomiques le plus transférables possible ('on the fly'). Ils sont regroupés dans 5 paragraphes :

- Stabilités structurales : Champ cristallin et interactions magnétiques.
- Ordre dans les structures complexes : Hamiltonien d'Ising et d'Heisenberg.
- Stabilité des Matériaux pour l'électronique : Grandeurs thermodynamiques et Modèle quasiharmonique
- Stabilité de Nano objets et Nanomécanique : Application des modèles des milieux continus.
- Structure locale et Propriétés des liquides surfondus : L'importance des simulations de type dynamique moléculaire ab initio.

A-I. Oxydes fonctionnels : Champ cristallin et interactions magnétiques

(Pasturel)

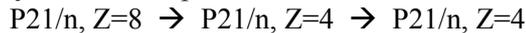
Transitions de phases sous pression

Collaboration : T. Pagnier, G. Lucazeau (INPG)

Ces études ont pour objectif une meilleure compréhension des propriétés de certains oxydes en relation avec leur structure cristallographique (magnétisme, ferroélectricité, ...). L'étude des phases sous pression est caractérisée par un couplage très fort entre spectrométrie RAMAN, diffraction de rayons X et simulations ab initio de structures.

- Polymorphisme de WO_3 :

Nous avons débuté dans ce domaine par l'étude du polymorphisme de l'oxyde WO_3 . L'évolution du polymorphisme de WO_3 sous pression a été mise en évidence par diffraction de RX. La séquence structurale qui ne concerne que la symétrie et les paramètres de maille des structures est établie comme suit :



Les déterminations structurales complètes des 2 phases sous pression ont été effectuées par simulation ab initio. A partir de la connaissance exacte de la position des atomes, le calcul des distances W-O et les angles O-W-O et W-O-W, paramètres fondamentaux de ces structures, permet d'interpréter les spectres RAMAN. La première phase obtenue sous pression est caractérisée par un réarrangement des octaèdres d'oxygène entre eux alors que la phase de plus haute pression est caractérisée par la déformation de ces octaèdres.

- Transition cristal-amorphe : le système $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$:

Une série de mesures de diffraction RX, de spectroscopie Raman et de fluorescence a démontré l'existence d'une séquence complexe de transitions de phase dans $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$ et une amorphisation à partir d'une pression de 2 GPa. Nous avons plus particulièrement étudié le mécanisme d'amorphisation et la séquence des phases dans le domaine de pression 2-7 GPa . Une série de calculs ab-initio visant à simuler le comportement de $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$ sous pression (optimisation des positions atomiques sous pression) a permis de mettre en évidence la destruction progressive de certains tétraèdres MoO_4 à partir de 2-3 GPa par éclatement de certaines liaisons MoO (perte de cristallinité), puis une recombinaison progressive de ces derniers à partir de 6 GPa (voir Figure). Pour la première fois, des résultats théoriques proposent un mécanisme de la transition cristal-amorphe qui associe la destruction progressive des tétraèdres de MoO_4 à l'organisation de certains oxygènes sous forme moléculaire.

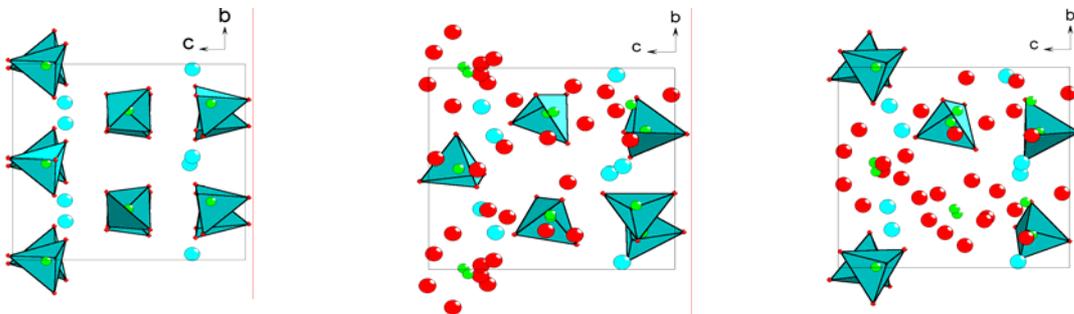


Figure 1 : Vue de dessus de la cellule de simulation de $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$, considérée successivement à pression nulle, à 4 GPa et 6 GPa . Les tétraèdres MoO_4 sont représentés en vert, les cations Eu en bleu. Lorsqu'une distance Mo-O éclate et ne permet plus de définir un tétraèdre, les ions O sont représentés en rouge. On observe qu'un tétraèdre s'est reformé à 6 GPa.

Transition de Phases (température-composition) de SrTiO_3 : Les Phases de Ruddlesden-Popper

Collaboration C. Bernard et A. Pisch (INPG)

Ces dernières années ont vu apparaître un regain d'intérêt pour ce composé isolant (gap de 3.2 eV) qui présente la particularité de se transformer en conducteur par effet de dopage, et ceci même pour une très faible concentration de défauts. Ce dopage peut être effectué en altérant n'importe lequel des trois sous réseaux (Sr, Ti, et O) en procédant par exemple à la substitution de lanthane ou de titane sur le site du strontium ($\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_{3-y}$ ou $\text{Sr}_{1-x}\text{Ti}_{1+x}\text{O}_{3-y}$). L'objectif des calculs ab initio est de déterminer les énergies de formation (et les grandeurs thermodynamiques associées) des différentes combinaisons de défauts susceptibles d'exister dans ce composé. Dans un deuxième temps, il sera d'analyser la structure électronique de ces phases présentant des défauts afin de mieux appréhender leurs propriétés de conduction électronique.

Pour commencer, nous nous sommes intéressés aux phases de Ruddlesden-Popper, $\text{Sr}_{n+1}\text{Ti}_n\text{O}_{3n+1}$, pour lesquelles les informations expérimentales concernant leur stabilité (états de base du système SrO-TiO₂ ou états métastables) sont contradictoires. Les résultats obtenus montrent que seuls les composés pour $n < 3$ sont états de base.

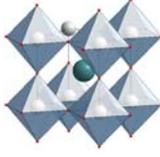
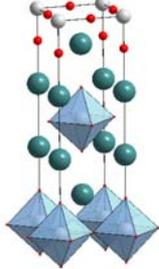
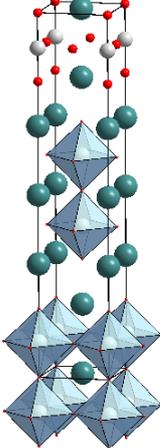
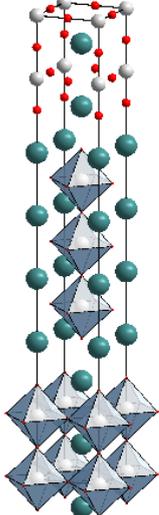
	SrTiO_3 (perovskite)	Sr_2TiO_4	$\text{Sr}_3\text{Ti}_2\text{O}_7$	$\text{Sr}_4\text{Ti}_3\text{O}_{10}$
Space Group	Pm-3m	I4/mmm	I4/mmm	I4/mmm
structure				

Figure 2: Groupe d'espace et structure cristallographique des composés $\text{Sr}_{n+1}\text{Ti}_n\text{O}_{3n+1}$: en rouge atomes d'oxygène, en bleu atomes de Sr, en gris atomes de Ti.

Potentiel d'intercalation dans les Olivines : une analyse thermodynamique
Collaboration S. Jobic (Nantes), O. Bengone (Strasbourg)

Concernant l'évolution technologique des batteries au lithium, le composé de type olivine, LiCoPO_4 , présente un intérêt majeur de part son potentiel d'intercalation très élevé. Cette grandeur étant reliée à la différence des énergies des composés lithié et non lithié, nous avons entrepris une étude fondamentale pour les composés de type olivine LiMPO_4 (M=Mn, Fe, Co et Ni) afin de comprendre cette propriété remarquable. Nous avons pu établir que la valeur du potentiel d'intercalation dans cette série est directement lié à l'état magnétique du métal de transition et non pas aux effets de champ cristallin classiquement utilisé pour interpréter les propriétés de cohésion des oxydes.

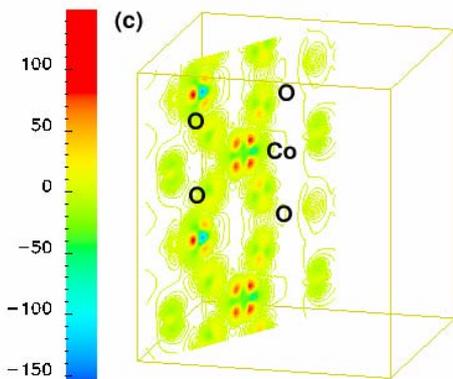


Fig. 3 : La projection de la densité de charge électronique issue des calculs ab-initio permet de visualiser le peuplement des orbitales moléculaires. Ici, on a représenté la différence entre la densité de charge magnétique et non magnétique de CoPO_4 dans le plan de base des octaèdres CoO_6 . On observe que le magnétisme conduit à un excès de charge dans les orbitales e_g pointant vers les oxygènes (en rouge). Les répulsions électroniques dans ces orbitales étant plus fortes, le composé voit son volume augmenter par rapport au calcul non magnétique, en accord avec l'expérience.

La figure 3 illustre notre résultat principal. Lorsque l'approximation LDA+U (qui tient compte des effets de répulsions électroniques intra-site) est utilisée, le magnétisme apparaît lié aux remplissages des orbitales e_g qui pointent vers les oxygènes (en opposition aux prédictions fournies par la théorie du champ cristallin). Cet exemple souligne l'importance du traitement du potentiel d'échange et corrélation pour cette famille de composés. On peut aussi voir Figure 4 quelles sont les conséquences sur des grandeurs plus macroscopiques comme le potentiel d'intercalation.

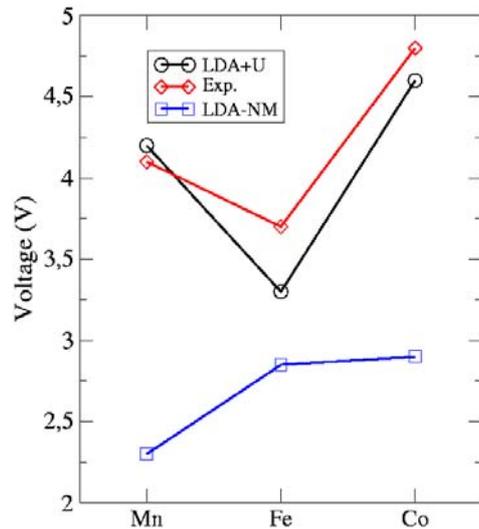


Figure 4 : Evolution du potentiel d'Intercalation en fonction de l'élément de transition.

A-II. Ordre dans les structures complexes : Hamiltonien d'Ising et d'Heisenberg.

Structure local et ordre magnétique dans les réseaux frustrés :
Collaboration C. Lacroix (LN), D. Nunez-Regueiro (Orsay)

L'intérêt pour les composés de type delafossite a été récemment renouvelé à la suite de la découverte de nouveaux oxydes de type $YCuO_{2\pm\delta}$. Ces systèmes sont magnétiquement frustrés car constitués de réseaux triangulaires de cations Cu^{2+} de spin $\frac{1}{2}$ couplés *via* des oxygènes supplémentaires (voir Fig. 5).

Les méthodes *ab-initio* (LSDA+U) sont alors utilisées pour construire les paramètres (intégrales d'échange) d'un Hamiltonien de spins :

$$H = H_0 + \frac{1}{2} \sum J_{ij} S_i S_j$$

Ces calculs montrent que les interactions intrachaines sont largement supérieures aux interactions interchaines ou interplans, permettant ainsi de réduire l'Hamiltonien de spins à 3 composantes. L'étude théorique est achevée et a permis de montrer que la structure locale (à l'échelle de quelques atomes) est essentielle pour comprendre le mécanisme qui gouverne l'ordre magnétique de ces composés.

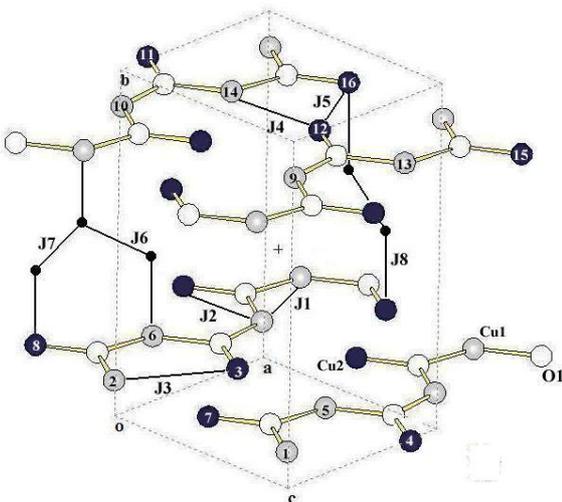


Fig.5 : Le composé de type delafossite $YCuO_{2.5}$ adopte une symétrie orthorhombique 2H. Les ions d'oxygène issus du dopage (blanc) se situent au centre des triangles de cuivre (gris et noir). Les paramètres d'échange intervenant dans notre hamiltonien de spin, $H=H_0 + 1/2 \sum J_{ij} S_i S_j$, sont représentés par des traits noirs : J1, J2, J3 définissent les interactions dans les chaînes, J4 et J5 les interactions entre chaînes et J6, J7 et J8 les interactions entre plans.

Les effets de température sont actuellement pris en compte dans des simulations de type Monte Carlo. L'étude des systèmes magnétiques frustrés se poursuit avec la détermination par les calculs *ab initio* des interactions d'échange dans les composés $NaNiO_2$ et $LiNiO_2$.

Ordre local dans les phases de Frank-Kasper

Collaboration M. Sluiter (Univ. de Sendai et Univ. de Delft), S. Fries (Access)

L'étude théorique de la stabilité des phases de Frank Kasper démarré il y a un peu plus de 6 ans s'est poursuivie dans 2 axes différents :

D'une part, l'étude de l'ordre local d'une nouvelle phase de type μ dans le système Ni-Nb en couplant un modèle d'Ising calculé à partir des calculs ab initio à une méthode variationnelle en amas pour analyser l'ordre local dans cette structure complexe. Cette approche nous donne le taux d'occupation des cinq sites cristallographiques différents ainsi que les grandeurs thermodynamiques de cette phase en fonction de la température et de la composition. On peut ainsi étudié à la fois le caractère stable et métastable de cette phase, analyse indispensable quand on connaît les propriétés mécaniques désastreuses des phases de Frank Kasper. Nous montrons que contrairement aux systèmes et aux structures précédentes (systèmes Re-Ta, Re-W et structures A15 et σ) le taux d'occupation des différents sites cristallographiques est déterminé par les interactions de paires plutôt que par les interactions de sites. Ce nouveau résultat trouve son origine dans une « chimie » d'interaction beaucoup plus complexe dans le système Ni-Nb que dans les systèmes Re-W et Re-Ta. Nous sommes à même de fonder les bases théoriques d'un modèle prédisant l'apparition d'un type de phases plutôt qu'un autre : compétition entre phases compactes, phases de Frank et Kasper et phases de Laves.

D'autre part, nous avons étudié le modèle thermodynamique appelé « compound energy formalism » qui est utilisé dans les approches de type CALPHAD. Nous avons mis en évidence les limitations de ce modèle phénoménologique. La validité du traitement thermodynamique de ce modèle est établie quand les énergies de site sont prépondérantes devant les interactions de multiplet. Notre analyse conclut donc qu'un tel modèle ne peut être mis en oeuvre sans une analyse très précise des interactions chimiques (qui ne peut être menée à bien que par le biais des calculs énergétiques ab initio).

Ordre chimique à courte distance dans les alliages Al_xPu_{1-x}

Collaboration B. Siberchicot (CEA-DAM), C. Colinet (INPG)

L'étude de la stabilité de composés intermétalliques à base de Plutonium a fait l'objet de la thèse de G. Robert : Octobre 2003). Dans une première étape, nous avons développé un traitement spécifique des états f du Plutonium que nous avons testé sur l'évaluation des propriétés thermodynamiques des différentes phases du Plutonium et sur le calcul de son diagramme de phases P-T. Nous avons ainsi mis en lumière une contribution importante des excitations électroniques et des termes anharmoniques à l'énergie libre de Gibbs. Nous avons poursuivi ce travail en étudiant la stabilité structurale des différents composés apparaissant dans les systèmes Pu-X (X=Al, Ga et In). Les énergies de formation très négatives sont dues à une très forte hybridation des états f-d du Plutonium avec les états sp du métal. Le traitement de la corrélation des états f est essentiel pour obtenir ce résultat. Enfin cette étude a été complétée par la compréhension de la stabilité structurale de la solution solide δ en fonction de la concentration et de la température et le calcul du diagramme de phases des systèmes Pu-X du coté riche en Plutonium à partir d'un hamiltonien d'Ising dérivé des calculs ab initio. Nous avons montré que les solutions solides δ PuGa et PuAl sont stables à température ambiante avec la prise en compte de l'ordre chimique à courte distance. Ce résultat est très important pour les applications puisque la ductilité de la phase δ assure une bonne mise en forme de ces alliages.

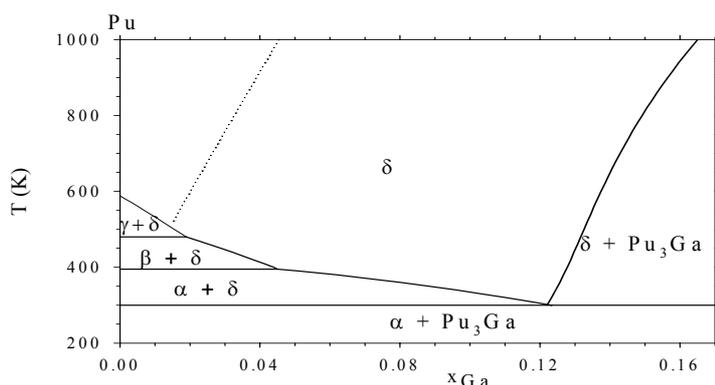


Figure 6 : Diagramme de Phases du système Pu-Ga : ligne pointillé : sans traitement de l'ordre chimique à courte distance, trait plein : avec traitement de l'ordre chimique à courte distance

Phases à longue période

Collaboration C. Colinet (INPG)

La présence de défauts planaires comme les parois d'antiphase dans les composés métalliques est un des problèmes majeurs de la métallurgie physique dans la mesure où ils modifient considérablement les propriétés mécaniques de ces composés. Une faible énergie de création de ces défauts conduit à l'apparition de structures à longue période

unidimensionnelle, la période étant reliée à la distance entre défauts. Nous avons entrepris l'étude théorique des énergies de parois d'antiphase et de leur interaction dans différents composés comme TiAl_3 , Ni_3V et $\text{Pt}_3\text{V}_x\text{Ti}_{1-x}$. Cette approche théorique a été menée en couplant calculs ab initio avec des Hamiltoniens effectifs de type Ising-APB et ANNNI. Nous montrons que les interactions à longue distance entre parois d'antiphase jouent un rôle essentiel pour déterminer la structure à longue période la plus stable. Les effets de température peuvent être également pris en compte en introduisant une entropie de configuration de type Bragg-Williams.

A-III. Stabilité des Matériaux pour l'électronique : Grandeurs thermodynamiques et Modèle quasiharmonique

(Pasturel)

Collaboration : W. Wolf et R. Podlucky (Univ. de Vienne), C. Colinet (INPG)

L'approximation quasiharmonique permet de calculer l'énergie interne d'un système en fonction de T et V à partir de l'évaluation du spectre de phonons dans un domaine de densités. Les autres grandeurs thermodynamiques se déduisent à partir des deux premières lois de la thermodynamique avec $S=0$ à $T=0$ (troisième loi).

Pour calculer l'équation d'état d'une seule phase, cette approche est suffisante dans la mesure où la contribution anharmonique ne joue aucun rôle (on peut alors utiliser d'autres hamiltoniens modèles tels que ceux donnés par les modèles de Landau). Pour des systèmes polyphasés, il est nécessaire d'évaluer l'équation d'état pour chaque polymorphe, le polymorphe le plus stable à une température et volume donnés étant déterminé sur le critère du minimum d'énergie libre. Le diagramme de phases est alors obtenu par construction de la tangente commune à deux phases à température constante. Toute cette présentation repose sur des équations de la mécanique statistique et de la thermodynamique qui sont bien connues. L'impact des calculs ab initio réside dans l'évaluation de la densité d'états de phonons. Depuis peu d'années, il est possible de faire ce calcul exactement pour tout type de composés, soit à partir de la dynamique de réseau (calcul de la matrice des constantes de forces), soit à partir de la théorie de la réponse linéaire.

Nous présentons ici une première application qui concerne le polymorphisme du composé TiSi_2 , un des matériaux essentiels pour l'industrie des composants électroniques. Le diagramme de phases expérimental donne la phase C54 comme seule phase thermodynamique stable à cette composition. Lors de l'élaboration de ce matériau à partir de la phase vapeur (technique d'élaboration utilisée en microélectronique), il apparaît systématiquement une autre phase, la phase C49, qui présente des propriétés électriques désastreuses pour les composants électroniques. Cette phase se transforme en la phase C54 par recuit à haute température et n'apparaît plus en cours de refroidissement. Elle est considérée comme phase métastable liée à la cinétique de croissance à partir de la cinétique de croissance de la phase vapeur. Les calculs ab initio couplés à l'approximation quasiharmonique offre un scénario complètement différent : la phase C49 est la phase thermodynamiquement stable à basse température et ne se transforme en phase C54 qu'à haute température.

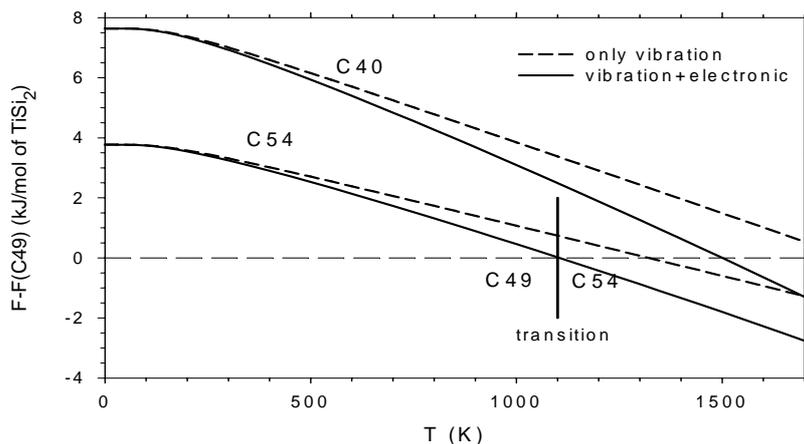


Figure 7 : Différences d'énergies libres entre les différentes phases du composé TiSi_2 . La phase C49 est prise comme référence.

Nous avons aussi montré que la transformation de phases solide-solide $\text{C54} > \text{C49}$ lorsque la température diminue est bloquée par des considérations cinétiques (défauts et densité volumique de la phase C49). Ces premiers résultats

obligent à reconsidérer la vision expérimentale des propriétés thermodynamiques de ce type de matériau (c'est aussi le cas pour CrSi₂).

A-IV. Stabilité des Nanoobjets et Nanomécanique : Application des modèles des milieux continus
(Peyla)

Déformation mécanique des surfaces recouvertes d'ad-atomes, d'îlots et de marches cristallines

Des défauts (atomes d'impuretés, agrégats d'atomes, marches cristallines) à la surface d'un solide élastique déforment ce dernier qui, en général, est un film déposé sur un substrat. L'énergie élastique stockée dans le solide déformé dépend de la distance entre ces défauts : *il en résulte une interaction effective d'origine élastique*. Les défauts, pour minimiser l'énergie libre (à nombre de défauts constant), vont diffuser en s'éloignant ou en se rapprochant. Il en résulte une auto-organisation de la matière à l'échelle atomique observée dans de nombreux systèmes où les contraintes dominent. La connaissance précise de la nature de ces interactions est donc fondamentale.

Dans le cadre de la théorie de l'élasticité des milieux continus, nous avons élaboré un modèle qui montre que cette interaction d'origine élastique peut-être soit attractive soit répulsive dépendant de la distribution des forces exercées par le défaut sur ses plus proches voisins et de la disposition d'un défaut par rapport à l'autre. Ce modèle permet également de quantifier l'interaction ad-atome - ad-atome, marche - marche ou îlot - atome à la surface d'un film mince.

Nous avons également pu comparer quantitativement les prédictions de notre modèle et des calculs de type premiers principes (ab initio) sur l'interaction élastique entre deux atomes d'oxygène déposés sur un plan basal de graphite. L'accord entre les deux méthodes est excellent même quand les défauts sont distants de seulement quelques mailles atomiques.

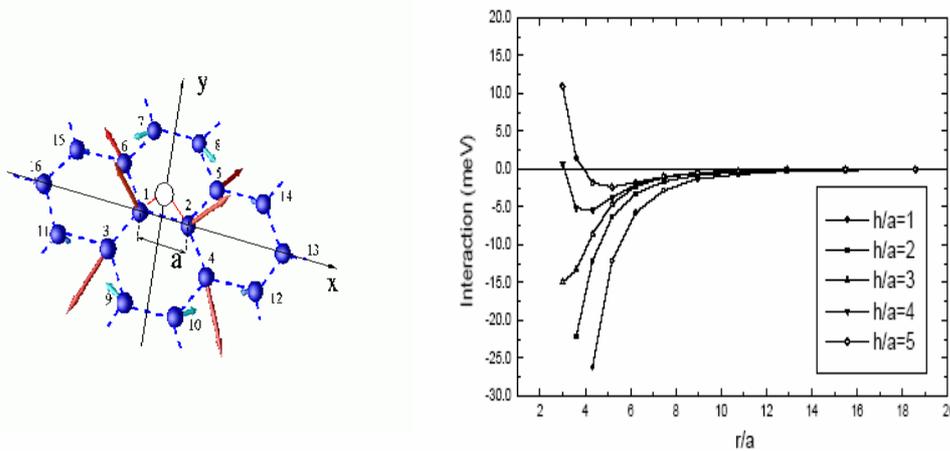


Figure 8 : a) Forces exercées par un atome d'oxygène (sphère blanche) en site « bridge » sur les atomes de carbones d'un plan de graphène (sphères bleues). Obtenu par calculs ab-initio. b) Interaction entre deux défauts distants de r/a sur un film d'épaisseur h/a, a étant la taille typique du défaut.

Comment modifier les propriétés mécaniques d'un matériau à partir de sa structure nanométrique
Collaboration D. Caillerie (L3S) et E. Bonnetier (LMC)

Une tôle plate possède un certain coefficient de rigidité en flexion D qui est proportionnel au module d'Young E multiplié par le moment d'inertie I par unité de longueur de la plaque perpendiculairement au plan de flexion: $D = EI$. Ainsi une tôle ondulée aura un moment d'inertie bien plus grand qu'une plaque plate, elle sera donc beaucoup plus rigide en flexion. Ce principe s'applique-t-il à l'échelle atomique ? Le graphite en présence d'oxygène présente une corrugation à l'échelle nanométrique. L'ensemble ainsi constitué est-il plus rigide ?

En se basant sur notre expérience sur le graphite en présence d'oxygène, nous avons calculé, avec les mêmes techniques ab initio (théorie de la fonctionnelle de la densité électronique), la rigidité en flexion d'un plan basal de graphite en présence d'une concentration d'oxygène atomique sur sa surface. Nous comptons également faire le même type de calcul sur des nanotubes de carbone. On sait que des impuretés peuvent affecter très fortement les structures de type graphite ou les nanotubes. Nos résultats montrent une rigidification très importante du graphite en présence d'oxygène : Pour une concentration d'oxygène atomique de 12% seulement, le système

graphite+oxygène devient environ 40 fois plus rigide ! Comme pour une plaque mince macroscopique, cela se produit à cause du gaufrage de la surface de graphite par oxydation.

Par ailleurs la combinaison entre calculs *ab initio* et théorie continue nous a permis de passer des échelles microscopiques (échelle de la structure cristallographique et de la chimie) aux échelles macroscopiques (les coefficients mécaniques), par une méthode d'homogénéisation.

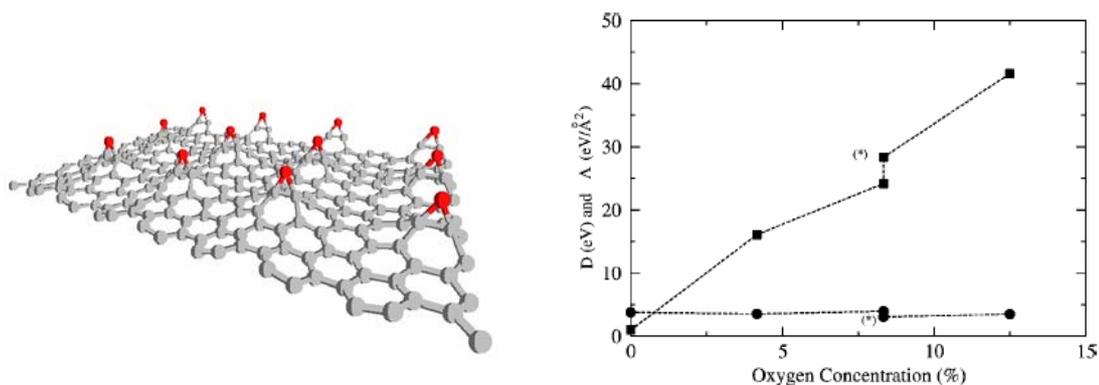


Figure 9 : Plan de graphène gaufré par de l'oxygène atomique (sphères rouges). Le coefficient de rigidité en flexion (D , carrés) est fortement augmenté par la présence d'oxygène alors que le coefficient d'extension (A , cercles) n'est pas affecté. Coefficients obtenus par calcul *ab initio*

A-V. Structure locale et Propriétés des liquides surfondus : L'importance des simulations de type dynamique moléculaire ab initio

(Pasturel)

Collaboration N. Jakse (Univ. de Metz, en délégation au CNRS Grenoble 2003), J. Hafner (Univ. de Vienne)

Comprendre la structure d'un liquide stable et surfondu représente à la fois un intérêt académique mais aussi technologique puisqu'il est maintenant bien établi que la structure locale d'un liquide joue un rôle prépondérant dans le mécanisme de nucléation. Depuis les travaux théoriques de Frank [1] il y a 50 ans, il est généralement admis qu'un liquide monoatomique sou-refroidi développe un ordre icosaédrique à courte distance, incompatible avec la périodicité d'une phase cristalline. Cette idée théorique a été confortée par des simulations de dynamique moléculaire basées sur un modèle de Lennard-Jones et est largement utilisée pour discuter des résultats expérimentaux. Cependant les interactions dans les systèmes métalliques et covalents ne peuvent être déduites d'un modèle aussi simple et notre objectif de recherche est d'améliorer la compréhension de la structure locale de liquides stables et surfondus en utilisant la dynamique moléculaire ab initio. Depuis une dizaine d'années, les études expérimentales tentent avec plus ou moins de subjectivité de mettre en évidence la présence d'un ordre icosaédrique local dans les métaux de transition liquides [1,2,3]. Pour notre part, nous nous sommes engagés depuis quatre ans dans une analyse théorique de la structure locale de liquides stables et surfondus en utilisant la dynamique moléculaire ab initio.

Métaux de transition surfondus

Tout d'abord, une première série de travaux ont permis de mieux comprendre l'ordre local dans les liquides stables et surfondus de métaux de transition et surtout de confirmer ou d'infirmer le discours expérimental qui avançait la présence d'un fort ordre icosaédrique dans les liquides surfondus de métaux de transition, indépendamment du métal de transition [1]. Trois systèmes ont été étudiés, Zr, Ta et Ni qui représentent chacun un métal de transition de début de série, de milieu de série et de fin de série.

Pour avoir une analyse plus fine de la structure locale des phases liquides, nous avons généré des structures inhérentes à $T=0K$ à partir de simulations ab initio de l'ordre d'une dizaine de picosecondes. Dans ce processus, une technique de gradients conjugués est utilisée pour amener chaque atome dans un minimum local d'énergie. On élimine ainsi les excitations thermiques et on fait apparaître une topologie sous-jacente, la structure inhérente. Une dizaine de configurations sont ainsi extraites afin d'obtenir une bonne statistique. Ces configurations sont alors analysées par la technique dite de paires liées qui permet de distinguer des structures telles que bcc, hcp, fcc, icosaédrique simple, icosaédrique complexe, ... Cette analyse est tridimensionnelle et fournit beaucoup plus d'informations sur l'ordre local que les facteurs de structure ou les distributions angulaires.

Pour ces 3 systèmes, l'ordre local à courte distance (SRO) est caractérisé par la présence d'une symétrie d'ordre 5 déjà dans la phase liquide stable au-dessus de la température de fusion (Tableau I). L'évolution du SRO en fonction de la température et plus particulièrement dans la phase surfondue, dépend du système étudié comme on peut le voir sur le tableau I.

Pour Zr, le SRO de type bcc est renforcé, ce qui est compatible avec la phase nucléante haute température. Pour Ta, on assiste à une compétition entre un ordre local de type A15 et un ordre local de type bcc ; cette compétition qui se développe dans le surfondu permet d'expliquer la présence de 2 transformations de phase successives qui apparaissent au cours de la solidification du Ta liquide surfondu. Enfin Ni surfondu développe un SRO avec une symétrie icosaédrique très marquée et sans aucune signature de la phase nucléante cfc. On peut donc conclure de ces résultats que l'évolution de l'ordre local dans les liquides de métaux de transition est beaucoup plus complexe que celle discutée depuis 30 ans par les expérimentateurs.

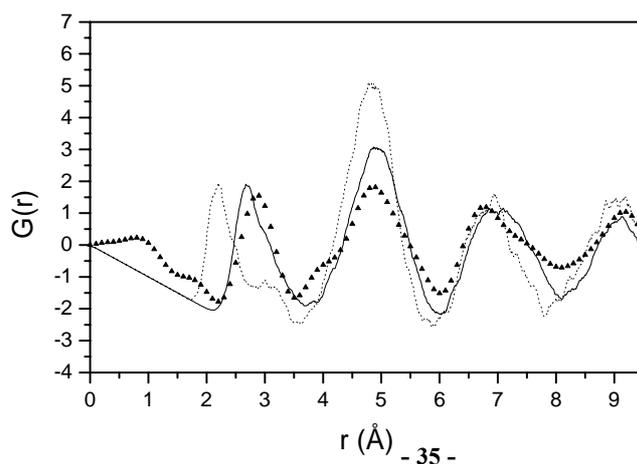
paires	Ni		Zr		Ta		Hcp	Fcc	A15	Bcc
	1850 K	1430 K	2500 K	2000 K	3500 K	2600 K				
1551	0.45	0.48	0.32	0.27	0.54	0.55	0.00	0.00	0.89	0.00
1541	0.18	0.13	0.16	0.10	0.12	0.10	0.00	0.00	0.00	0.00
1431	0.15	0.08	0.11	0.14	0.09	0.07	0.00	0.00	0.00	0.00
1421	0.01	0.00	0.01	0.00	0.01	0.00	0.50	1.00	0.00	0.00
1422	0.03	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.50	0.00	0.00	0.00
1201	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1211	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1301	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1311	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1321	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1331	0.00	0.00	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1441	0.05	0.09	0.10	0.14	0.06	0.08	0.00	0.00	0.00	0.57
1661	0.10	0.16	0.16	0.23	0.13	0.17	0.00	0.00	0.11	0.43
2101	1.16	1.01	0.96	1.03	1.57	1.56	1.50	1.00	1.67	1.57
2211	0.78	0.80	0.89	0.72	0.75	0.75	1.50	2.00	0.33	1.71
2321	0.05	0.02	0.04	0.15	0.03	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
2331	1.11	1.11	0.90	0.82	1.21	1.20	0.17	0.00	1.70	0.00
2441	0.17	0.24	0.31	0.41	0.17	0.21	0.50	0.50	0.00	0.86

Tableau I

Alliages liquides $Al_{80}Ni_{20}$ et $Al_{80}Mn_{20}$

Dans le même contexte, l'étude de l'ordre structural dans les alliages métalliques liquides $Al_{80}Ni_{20}$ et $Al_{80}Mn_{20}$ a été entreprise. L'étude expérimentale a été menée il y a maintenant un peu plus d'une dizaine d'années afin de mettre en évidence la présence d'un ordre icosaédrique dans l'alliage $Al_{80}Mn_{20}$ qui donne lieu par trempe à une phase quasicristalline. L'interprétation des résultats expérimentaux soit par méthode de Monte Carlo inverse, soit par Hamiltonien de Liaisons fortes conduit à des résultats contradictoires. Nous avons donc entrepris des simulations de dynamique moléculaire ab initio afin de déterminer précisément la structure locale de ces liquides. Le protocole des calculs est identique à celui utilisé pour les métaux purs, les cellules de simulation étant de 256 atomes. Le résultat le plus remarquable de cette première série de calculs est que la distribution partielle MnMn dans l'alliage $Al_{80}Mn_{20}$ dépend de l'état magnétique du Mn. On peut constater une très grande différence entre les deux séries de calcul et la nécessité d'inclure la variable spin dans les calculs.

Figure 10 : traits pleins (polarisé en spin), pointillés (non polarisé en spin), symbole : expérience



L'analyse des facteurs partiels de type Bhatia-Thorton indique pour les 2 alliages un ordre chimique à courte distance très prononcé mais un ordre topologique qui se développe sur une distance interatomique plus grande dans l'alliage $Al_{80}Mn_{20}$ que dans l'alliage $Al_{80}Ni_{20}$. L'analyse en paires liées des structure inhérentes des 2 alliages liquides indique une plus forte prédominance de la symétrie d'ordre 5 autour des atomes de Mn qu' autour des atomes de Ni (voir tableau II).

Pairs	$Al_{80}Ni_{20}$		$Al_{80}Mn_{20}$	
	Total	Ni	Total	Mn
1551	0.14	0.25	0.18	0.37
1541	0.15	0.10	0.14	0.13
1431	0.25	0.34	0.21	0.21
1421	0.05	0.04	0.03	0.02
1422	0.10	0.07	0.10	0.05
1201	0.02	0.00	0.03	0.00
1211	0.01	0.00	0.01	0.00
1301	0.02	0.01	0.02	0.00
1311	0.10	0.06	0.08	0.02
1321	0.06	0.04	0.07	0.02
1331	0.00	0.00	0.00	0.00
1441	0.03	0.07	0.04	0.08
1661	0.03	0.01	0.03	0.06
1771	0.00	0.00	0.00	0.00
1881	0.00	0.00	0.00	0.00
2101	1.81	1.96	1.75	1.71
2211	1.00	1.17	0.93	1.08
2321	0.18	0.10	0.15	0.06
2331	0.59	0.65	0.64	0.76
2441	0.13	0.08	0.13	0.11

Tableau II

Notre résultat peut être considéré comme une preuve que la symétrie d'ordre 5 est prépondérante dans les alliages liquides qui forment des phases quasicristallines par des méthodes de trempe rapide.

L'étude des propriétés magnétiques des alliages liquides $Al_{80}Mn_{20}$ a été aussi abordée. La propriété la plus remarquable de ces alliages liquides est une augmentation de la susceptibilité magnétique quand la température augmente. Un tel comportement est opposé à celui donné par les théories usuelles de fluctuation de spin (de type Curie-Weiss). Pour interpréter cette évolution spectaculaire, il a été proposé par les expérimentateurs deux types de Mn, un type porteur de moment magnétique, l'autre type ne portant pas de moment. Les deux approches théoriques de l'époque basées sur des dynamiques moléculaires classiques associées à des Hamiltoniens semiempiriques ont fourni des résultats contradictoires concernant l'origine du magnétisme dans ces alliages liquides. De plus elles ont été incapables de reproduire la dépendance de la susceptibilité magnétique en fonction de la température.

Nos résultats montrent d'une part que l'ordre local (la symétrie d'ordre 5) autour du Mn n'évolue pas en fonction de la température. La distribution des valeurs du moment magnétique pour chaque température s'interprète sur la base de fluctuations des distances entre les atomes de Mn et les atomes d'Al premiers voisins autour de distances moyennes qui définissent la symétrie d'ordre 5 (un décaèdre en représentation 3D) . Nous trouvons aussi que la valeur moyenne de ces distributions augmente quand la température augmente (de 2.18 μB à 1220K à 2.70 μB à 1520K), cette évolution pouvant s'expliquer simplement à partir de l'expansion thermique de l'alliage liquide.

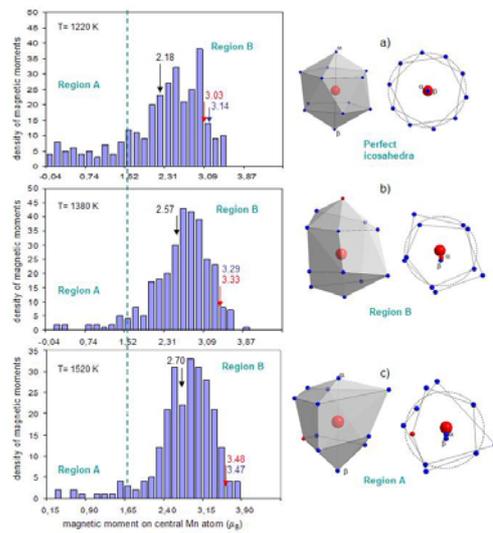


Figure 11: Evolution de la distribution des moments magnétiques des atomes de Mn dans les alliages liquides Al80Mn20 en fonction de la température.

Silicium surfondu

L'étude du silicium en surfusion a été également abordée afin d'interpréter le comportement particulier de la fonction de corrélation de paires qui conduit à une diminution du nombre de coordination lorsque la température diminue. Nous avons pu aussi discuter de la présence possible d'une transition liquide-liquide dans le surfondu. Des simulations complémentaires sont en cours car le débat scientifique est plutôt animé autour de ce sujet.

B. Théorie des systèmes mésoscopiques 2002-2005

chercheurs:

Frédéric FAURE (MCF)
Frank HEKKING (PR)
Fabio PISTOLESI (CR)
Peter SCHUCK (DR)
Pascal SIMON (MCF)
T. ZIMAN (DR), resident à l'Institut Laue Langevin (ILL, Grenoble)
Guillaume BIGNON (thésard)
Raffaello FERONE (thésard)
Alexandre RATCHOV (thésard)
Julien SALOMEZ (thésard)

Visiteurs :

Alain JOYE (PR, Institut Fourier, Grenoble)

Etudiants encadrés

Mikael Hansen (M1 UJF & Master Copenhague), *Effets topologiques en mécanique quantique* (Faure).
Angelika Bender (M2 UJF & Diplomarbeit Karlsruhe), *Pompage paramétrique de charge dans un système mésoscopique* (Hekking).
Raffaello Ferone (Thèse de *Laurea*, Naples), *Transport thermique dans un fil quantique* (Hekking).
Heidi Förster (M1 UJF), *Etude du couplage d'une jonction tunnel à son environnement* (Hekking).
Julian Hauss (M1 UJF), *Interaction entre un SQUID et un champ monochromatique* (Hekking).
Thuy Anh Thu Pham (M1 UJF), *Calcul du courant Josephson dans le cadre du modèle de Kulik* (Hekking).
Guillaume Bignon (DEA Lyon), *Bruit de grenaille dans une jonction mésoscopique métal normal – métal normal* (Pistolesi, Hekking).
L. Alasseur (Magistère de Mathématiques UJF) *Fluctuations stochastiques dans les navettes de charges* (Pistolesi).
R.J. Flassig (M1 UJF), *Charge shuttle instabilities in carbon nanotubes* (Pistolesi).
Sylvain Dahiot (École Polytechnique dernière année), *Étude du transport à travers un système mésoscopique couplé latéralement à une impureté magnétique* (Simon).
Emmanuel Canevet (M1 UJF), *Liens entre propriétés de transport et propriétés thermodynamiques dans un système mésoscopique* (Simon).

Participation dans des GDR :

GDR 2253, Imagerie, Communication et Désordre (IMCODE)
GDR 2279, Mathématiques et physique quantique
GDR 2285, Information et Communication Quantique
GDR 2426, Physique quantique mésoscopique

Préambule :

La recherche fondamentale sur les systèmes de dimensions réduites a connu un grand essor pendant ces dernières années. Cette croissance remarquable est étroitement connectée aux besoins des sciences et technologies de l'information et de la communication, l'un des défis majeurs étant le développement de circuits intégrés plus petits et plus performants. D'une part il s'agit de mieux comprendre les implications des effets de petite taille sur les propriétés des métaux ou des semi-conducteurs conventionnels. D'autre part, on cherche une ouverture vers de nouveaux concepts comme les structures hybrides (structures formées de l'association de différents matériaux spécifiques comme les métaux normaux, supraconducteurs ou ferromagnétique), la nano-mécanique ou encore l'information quantique. Les recherches de notre équipe se situent pleinement dans cette perspective et concernent le transport et le bruit, électrique et thermique, dans des conducteurs nanostructurés, ainsi que la supraconductivité mésoscopique. La plupart des activités de recherche menées au sein de l'équipe sont effectuées en étroite collaboration avec des équipes théoriques ou expérimentales locales, nationales ou internationales. Nous participons dans plusieurs réseaux, nationaux et internationaux. L'équipe organise un séminaire de physique mésoscopique informel hebdomadaire (responsable : F. Pistolesi). Ce séminaire a principalement un but pédagogique : les orateurs présentent leur travail au tableau noir pour permettre une participation active du public. La participation du séminaire n'est pas réservée aux membres d'équipe : plusieurs chercheurs grenoblois y participent.

B-I. Chaos ondulatoire ; effets topologiques en physique moléculaire

(Faure)

Collaboration externe : S. Nonnenmacher (Service Physique théorique, CEA-Saclay), S. DeBièvre (mathématiques, Université de Lille) et B. Zhilinskii (Dunkerque).

Nous nous intéressons à comprendre la dynamique quantique dans le cas chaotique. Nous espérons obtenir des propriétés sur les fonctions d'ondes stationnaires et sur les énergies propres. Cela pourrait aider à comprendre par exemple pourquoi le "modèle des matrices aléatoires" reproduit si bien les propriétés statistiques des niveaux d'énergie, ou encore pourquoi certaines fonctions d'ondes sont très localisées sur des orbites périodiques instables (phénomène de « cicatrices » ou « scars » qui est à priori paradoxale). Récemment, nous avons obtenu un nouveau résultat qui est d'exhiber et caractériser des états quantiques cicatrisés dans le modèle chaotique dit "du chat d'Arnold", qui est une dynamique hyperbolique sur le Tore. Nos travaux actuels étendent cette étude aux systèmes chaotiques plus généraux, et tentent d'établir une relation avec le formalisme thermodynamique de Ruelle pour les dynamiques chaotiques.

En physique moléculaire, et plus généralement dans le "problème à N corps", lorsqu'il y a un couplage entre une dynamique lente et une dynamique rapide, les niveaux d'énergie se regroupent par bandes. Cette situation est fréquente dans les molécules, car par exemple les électrons légers ont un mouvement beaucoup plus rapide que les noyaux atomiques plus lourds. Nous avons montré que le nombre de niveaux appartenant à chacune des bandes s'exprime à partir d'indices topologiques que l'on obtient en faisant une description classique de la dynamique lente (approximation de Born Oppenheimer), grâce à la formule de l'indice d'Atiyah-Singer. Ce résultat montre qu'il serait possible de faire une description qualitative de spectres moléculaires complexes, et plus généralement de dynamiques quantiques complexes à plusieurs corps, description qui mettrait en évidence des propriétés robustes et qualitatives du spectre, comme le regroupement des niveaux d'énergies ou des échanges de niveaux entre sous bandes. Par exemple on a mis en évidence un nouveau phénomène physique, qui est celui de bandes "topologiquement couplées".

B-II. Systèmes quantiques ouverts, décohérence

(Ratchov, Faure, Hekking)

Nous étudions la décohérence à température nulle, à travers l'étude d'un modèle simple. Le problème de la décohérence à température nulle fait l'objet d'un débat en ce moment, suite à des résultats expérimentaux, montrant une longueur de cohérence finie à température nulle et suite à des modèles théoriques interprétant cette décohérence comme résultant de l'interaction entre le système et son environnement, et en particulier des "fluctuations du vide quantique de l'environnement". Nous proposons un dispositif expérimental de type interférentiel assez simple qui mettrait clairement en évidence ce phénomène de décohérence résiduelle à température nulle.

B-III. Pompage adiabatique

(Hekking)

Collaboration externe : A. Bender (étudiante M2), R. Fazio, M. Governale et F. Taddei (Scuola Normale, Pise), J. Pekola (HUT, Finlande), Y. Gefen (Weizmann Institute, Israel).

La possibilité de manipuler de façon cohérente des charges dans les dispositifs nanostructurés a un impact important sur des domaines variés comme la nano-électronique ou alors le traitement de l'information quantique. Le pompage adiabatique est le transfert de charges, suite à une modulation périodique et adiabatique de quelques paramètres du système (tensions appliquées, champ magnétique, ...). Le pompage permet de déplacer les charges de façon très contrôlée, tandis que le dispositif reste en équilibre. C'est pourquoi que le pompage adiabatique a été proposé comme candidat pour implémenter un standard métrologique de courant. Quant à l'information quantique, la conservation de la cohérence quantique pendant le pompage adiabatique fait que ce principe peut être utilisé pour générer dynamiquement de l'enchevêtrement quantique.

Dans ce cadre, nous avons étudié le transfert adiabatique de paires de Cooper dans une pompe supraconductrice. Le pompage est effectué par une modulation périodique de deux tensions de grilles, qui elles modifient le blocage de Coulomb. Dans la limite où l'énergie de charge E_C est supérieure à l'énergie Josephson E_J , la charge Q_P transférée par période est due aux processus tunnel incohérents et donnée par sa valeur classique de $2e$: une paire de Cooper. L'effet Josephson donne lieu à des corrections cohérentes dépendant de la différence de phase ϕ_0 à travers le dispositif : $I - Q_P/2e \sim (E_J/E_C) \cos \phi_0$. Nous avons théoriquement étudié comment une mesure de la charge pompée influence la cohérence quantique et modifie la charge Q_P .

Ensuite nous avons étudié en détail l'évolution de la phase de la fonction d'onde, induite par le pompage paramétrique. Nous avons étudié la signification physique de cette phase pour un système particulier : une boucle mésoscopique avec un impureté variable. La boucle est percée par un flux magnétique qui induit des courants permanents. Nous avons calculé la charge totale transférée dans la boucle sous une modulation périodique en fonction du temps du flux et de la force de l'impureté. Nous montrons que la charge est directement liée à la phase de la fonction d'onde. Nous trouvons en particulier la relation entre la charge pompée et la phase géométrique dite *de Berry*.

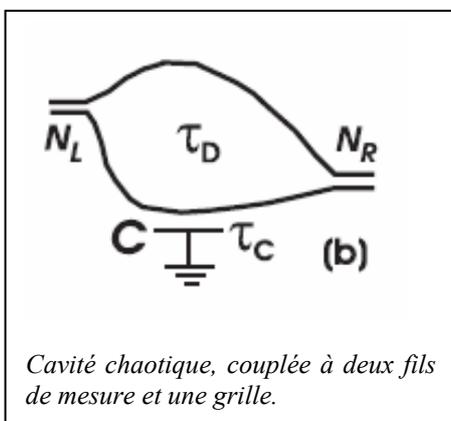
Finalement, nous avons également développé un formalisme pour étudier le pompage adiabatique dans une structure hybride comprenant deux électrodes supraconductrices et un métal normal. Nous avons montré que, à température nulle, il existe une relation entre la charge pompée la phase géométrique de Berry, accumulée pendant une période par les états liés d'Andreev dans le métal normal. Nous avons analysé en détail le cas où la taille du métal normal est petite devant la longueur de cohérence supraconductrice. Nous avons trouvé que la charge pompée est une fonction paire de la différence de phase ϕ_0 à travers le dispositif. Cela permet de la distinguer de l'effet Josephson habituel, qui est une fonction impaire de ϕ_0 .

B-IV. Bruit à fréquence finie

(Hekking)

Collaboration externe : J. Pekola (HUT, Finlande)

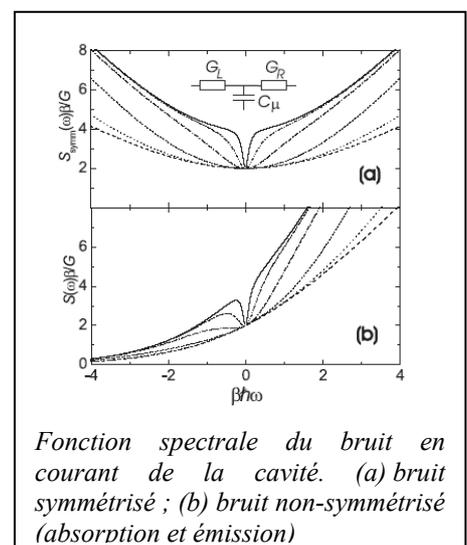
Le bruit en courant nous apporte des informations importantes sur les mécanismes de transport dans un conducteur mésoscopique. La plupart des travaux sur le bruit jusqu'ici sont consacrés au bruit à fréquence nulle. Cependant, le bruit à fréquence finie est intéressant pour plusieurs raisons. Tout d'abord, du point de vue théorique, il contient des informations sur la dynamique intrinsèque au conducteur (temps de séjour ou de Thouless, temps associé aux phénomènes collectifs d'interaction). Du point de vue expérimental, le développement de détecteurs sensitifs comme les systèmes quantiques à deux niveaux (qubits) permet de mesurer le bruit résolu en fréquence, à travers les phénomènes d'émission et d'absorption.



Nous avons développé un calcul quantique, basé sur la théorie de diffusion, du bruit de courant à fréquence finie d'une cavité chaotique.

Nous avons traité les interactions Coulombiennes de longue portée en utilisant une grille de capacitance C . Nous avons obtenu des résultats explicites pour la fonction spectrale du bruit qui montrent la dépendance en fonction de deux temps caractéristiques : le

temps de séjour t_D et le temps RC t_{RC} de la cavité vis-à-vis de la grille. Le spectre d'émission et d'absorption associé à ce bruit est caractérisé par des anomalies à des fréquences de l'ordre de $t^{-1} = t_D^{-1} + t_{RC}^{-1}$.



B-V. Transport thermique

(Ferone, Hekking)

Collaboration externe : R. Fazio (Scuola Normale Superiore, Pise), C. Biogini et V. Tognetti (INFM et Université de Florence), I.S. Beloborodov, A.V. Lopatin, et V.M. Vinokur (Argonne National Laboratories, USA)

Dans la théorie des liquids de Fermi, la charge ainsi que l'énergie sont portées par des quasi-particules fermioniques. Cela donne lieu à une relation universelle entre la conductance électrique G et la conductance thermique K : $K/TG = L$, la loi de Wiedemann-Franz (WF). Ici, T est la température et L une constante universelle, le nombre de Lorentz. Dans un conducteur mésoscopique, des effets quantiques ainsi que la présence d'interactions peuvent modifier la loi de WF. Nous avons étudiés ces modifications pour plusieurs cas.

Pour un fil quantique en présence d'un faible désordre et d'interactions répulsives entre électrons, ces effets peuvent être traités dans le cadre du modèle du liquide de Luttinger. Sans désordre, les interactions ne renormalisent que la conductance thermique. La loi de WF est violée avec une suppression du nombre de Lorentz à basse température. En présence de désordre, K et G sont renormalisés simultanément, et d'autres corrections induites par le désordre apparaissent. Nous avons analysés ces corrections en fonction de la température et de la force du désordre. Nous trouvons que la loi de WF est toujours violée à basse température.

Nous avons étudié le transport thermique pour un métal granulaire avec une conductance tunnel g_T élevée entre les grains et pour des températures intermédiaires $T > g_T \delta$, où δ est l'espacement entre les niveaux d'énergie pour un grain. Nous avons calculé la conductivité thermique, tout en prenant en compte l'effet des interactions Coulombiennes. Nous avons démontré que la loi de WF est violée pour les métaux granulaires.

Dans un métal supraconducteur granulaire à une température T juste au-dessus de la température critique T_C , les fluctuations supraconductrices donnent lieu à des corrections pour la conductivité thermique. Nous avons calculé ces corrections pour montrer qu'elles diminuent la conductivité thermique d'un facteur $\sim T_C / (T - T_C)$. Pour $T \sim T_C$ nous trouvons une saturation de cette correction $\sim 1/z g_T$ où z est le nombre de proches voisins. Dans les deux limites, la loi de WF est violée.

B-VI. Nanocircuits supraconducteurs à base de jonctions Josephson

(Hekking)

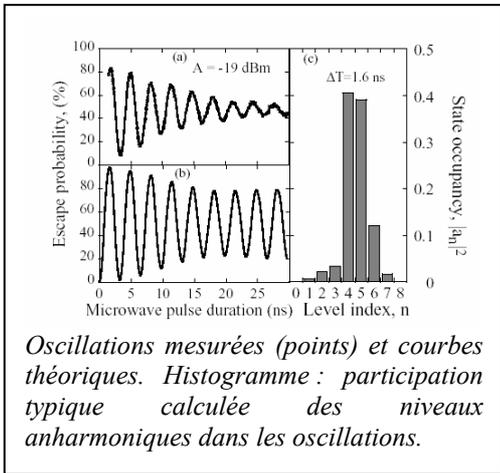
Collaboration externe : O. Buisson (CNRS-CRTBT), J. Pekola (HUT, Finlande)

Le calcul quantique est une thématique de grande actualité qui se situe à la frontière entre la théorie de l'information classique, les sciences de l'informatique et la mécanique quantique. Le concept de base pour cette information quantique est le bit quantique (dit qubit) qui correspond à une superposition de l'état 0 et 1. Sa manipulation permet d'effectuer les opérations. Cependant sa réalisation expérimentale constitue un défi pour les sciences fondamentales car peu de systèmes physiques ne remplissent, aujourd'hui, toutes les conditions requises (long temps de décohérence, intégrabilité, reproductibilité des circuits). Parmi les systèmes expérimentaux envisagés, les circuits quantiques à base de nano-jonctions Josephson supraconductrices sont prédits comme pouvant être des candidats potentiels. Plusieurs expériences ont démontré que ce type de circuit se comporte comme un système quantique à deux niveaux avec des états propres qui évoluent de façon cohérente dans le temps. En particulier, il a été démontré que l'on peut manipuler, laisser évoluer et mesurer un seul qubit Josephson avant la décohérence du système.

Nous avons effectué plusieurs études dans ce domaine, en étroite collaboration avec des équipes expérimentales au CNRS-Grenoble et à Helsinki (HUT, Finlande).

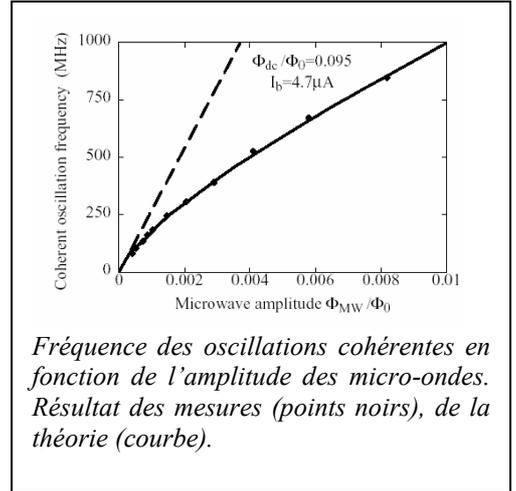
Mesure quantique et oscillations cohérentes

Nous avons proposé une mesure quantique de type dit single shot afin de déterminer l'état d'un qubit Josephson de charge. Le qubit comprend une boîte à paires de Cooper, le détecteur proposé est un SQUID. Le système couplé est l'analogie d'un atome de Rydberg (le qubit) dans une cavité électromagnétique (le SQUID). Le SQUID peut basculer d'un état supraconducteur (tension nulle aux bornes) vers un état dissipatif (tension non-nulle aux bornes) par l'effet tunnel macroscopique, ce qui permet d'effectuer la mesure quantique.



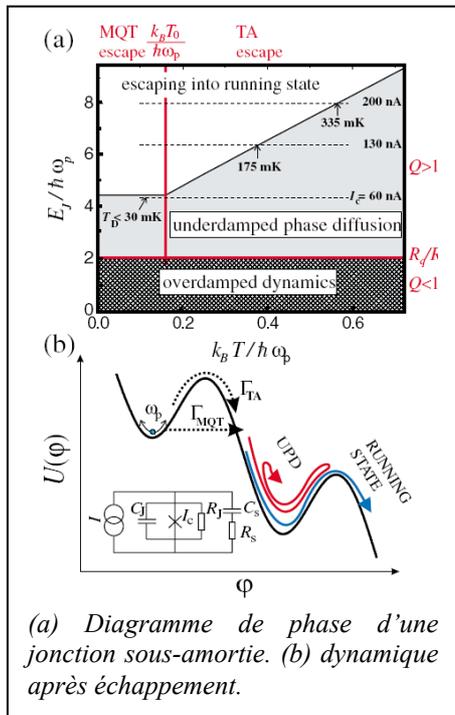
Nous avons ensuite étudié la dynamique quantique d'un SQUID, sous l'influence d'une irradiation avec des micro-ondes. Le SQUID est un système quantique anharmonique à plusieurs niveaux.

Expérimentalement, des oscillations cohérentes en fonction du temps ont été observées. Le nombre d'états quantiques impliqués dans ces

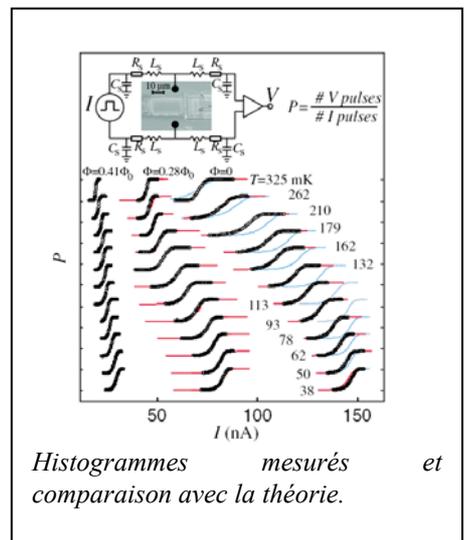


oscillations augmente avec l'amplitude des micro-ondes. La dépendance de la fréquence des oscillations en fonction de l'amplitude des micro-ondes est fortement non-linéaire. Nous avons développé un modèle théorique qui prend en compte l'anharmonicité du système à plusieurs niveaux. Ce modèle est en très bon accord avec les résultats expérimentaux.

Dynamique d'échappement



Nous avons étudié la dynamique d'échappement d'un état supraconducteur à tension nulle vers un état dissipatif à tension non nulle d'une jonction Josephson sous amortie en fonction de la température T . La jonction est caractérisée par un couplage Josephson relativement faible. Nous avons en particulier construit le diagramme de phase dans le plan $T-E_J$ et nous avons mis en évidence un régime nouveau, dit de diffusion sous amortie de phase. Pour ce régime, la forme des histogrammes d'échappement devient très particulière et ne peut être comparée avec des théories existantes (activation thermique ou effet tunnel macroscopique). Nous avons développé un modèle qui décrit correctement les trois régimes du diagramme de phase et dont les résultats peuvent être comparés avec les données expérimentales.



Fluctuations thermiques dans les nano-jonctions Josephson

(Pistoiesi, Hekking)

Collaboration externe: I. Beloborodov (Bell Labs, USA)

Nous avons étudié l'influence des fluctuations thermiques sur la caractéristique $I-V$ d'une petite jonction tunnel Josephson couplée à un environnement résistif dans la limite sous-amortie. Sans fluctuations, cette caractéristique a une forme particulière, connue sous le nom de *nez de Bloch*. Pour la première fois cette caractéristique a été observée [M. Watanabe et D. Haviland, Phys. Rev. Lett. **86**, 5120 (2001)]. Suite à des discussions avec D. Haviland, nous avons compris que les théories précédentes n'avaient pas inclus l'effet des fluctuations thermiques dues à l'environnement résistif. Nous avons donc calculé comment la structure est élargie en fonction de la température et de la résistance. L'accord avec le résultat expérimental est bon, et nous travaillons en ce moment en collaboration avec le groupe de D. Haviland pour comprendre des structures plus complexes.

B-VII. Fluctuation du courant dans les systèmes hybrides supraconducteur/métal normal

(Bignon, Pistolesi, Hekking)

Collaboration externe : M. Houzet (CEA)

Lorsqu'un métal normal est mis en contact avec un supraconducteur et qu'une tension V , beaucoup plus petite du gap du supraconducteur divisé par la charge électronique, est appliquée à la jonction, la seule façon de transmettre de la charge consiste à ajouter une paire de Cooper dans le supraconducteur et éliminer deux électrons dans le métal normal. Ce phénomène est bien connu et porte le nom de *réflexion d'Andreev*. Il a été très étudié dans les dernières 10-15 ans du point de vue expérimental et théorique. Actuellement l'intérêt se porte principalement sur les fluctuations de charge, c'est-à-dire les corrélations du courant, la première étant le courant lui-même et la deuxième le bruit. La connaissance de tous les moments du courant est équivalente à la connaissance de la statistique complète de la transmission de charge (*full counting statistics*). Du point de vue théorique grâce aux travaux de Levitov, Lesovik, et Lee et de Nazarov, nous disposons maintenant d'une méthode pour calculer la statistique complète. Du point de vue expérimental la mesure du bruit a été faite sur plusieurs systèmes et les moments d'ordre supérieur (troisième et quatrième) ont été mesurés par certaines groupes dans des cas simples pour l'instant (groupe de Prober à Yale et groupe de Saclay).

La réflexion d'Andreev est particulièrement intéressante du point de vue de la physique mésoscopique parce qu'elle est très sensible à la cohérence de phase. Une autre façon de voir la réflexion d'Andreev est de dire que l'électron qui vient du métal normal est réfléchi à l'interface avec le supraconducteur en tant que trou. Cela génère une transmission de deux électrons à la fois. Or, une contribution importante à la conduction vient des chemins quantiques où le trou qui est rétro-réfléchi suit le même chemin de l'électron incident. Toutes les phases aléatoires accumulées par l'électron sont ainsi éliminées par le trou qui les accumule avec le signe opposé. La seule phase qui n'est pas éliminée est la différence de phase accumulée pendant la propagation entre l'électron et le trou. Elle est due à la petite différence de vecteur d'onde entre l'électron et le trou qui se trouvent à la même distance ε de la surface de Fermi, mais l'un au dessus et l'autre au dessous. Cette dépendance de l'énergie se manifeste expérimentalement avec une dépendance en fonction du voltage de la conductance ou du bruit.

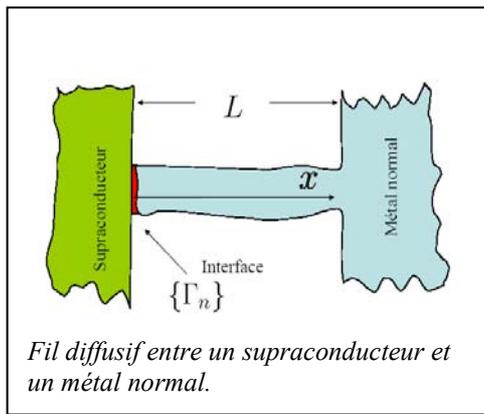
Depuis 2002 nous avons une activité bien développée sur l'étude de la fluctuation du courant dans les systèmes hybrides. Dans la suite nous allons donner une description des volets principaux de recherche.

Bruit de courant dans les jonctions tunnel NS

Nous avons étudié l'effet des interférences dans le bruit en courant pour une jonction tunnel métal-normal/supraconducteur. L'importance des interférences était bien connue pour la conductance qui est fortement non linéaire (Hekking-Nazarov) et qui dépend de la géométrie de l'échantillon. Nous avons déterminé le rapport entre le bruit et le courant en fonction de la température et de la tension appliquée. Dans le cas où le métal normal est à l'équilibre le résultat ne dépend que de la température et du voltage appliqué. En revanche, si la partie normale n'est pas à l'équilibre thermodynamique, comme dans un fil diffusif de longueur inférieure à la longueur de diffusions inélastiques, le rapport entre le bruit et le courant dépend des détails du système, en particulier de sa géométrie. Nous l'avons calculé explicitement pour un cas réalisable expérimentalement.

Dépendance en énergie du bruit dans des structures diffusives hybrides

Nous avons étendu la technique de Nazarov pour obtenir le bruit en courant dans les structures diffusives en présence de supraconductivité au cas plus général d'une jonction avec une distribution arbitraire des canaux de transmission. Tous les calculs disponibles à énergie finie n'étaient valables que pour le cas tunnel. Nous trouvons que le rapport entre le bruit différentiel et la conductance différentielle en fonction de l'énergie dépend fortement de la transparence de l'interface, et pas seulement de la conductance (transparence multipliée par le nombre de canaux). Donc, cette information peut être utilisée pour caractériser l'interface.



Nous avons maintenant étendu ces résultats au cas d'une cavité chaotique connectée à travers deux interfaces arbitraires à un réservoir normal et à un réservoir supraconducteur. Des expériences menées au CEA de Grenoble ne sont pas expliquées avec la théorie tunnel existante. D'ailleurs, il y a des raisons pour croire que l'interface ne soit pas tunnel. Nous trouvons qu'en supposant une interface désordonnée nous pouvons améliorer significativement l'accord avec l'expérience pour ce qui concerne la conductance. Le bruit est en cours de mesure. Cette recherche a été financée par le biais d'un contrat de l'Institut de la Matière Condensée (IPMC) de Grenoble.

Corrélation croisée dans des structures multi terminaux tunnel

Nous avons aussi considéré la corrélation croisée dans des structures multi terminaux tunnel. Nous trouvons qu'on peut observer le signe de la corrélation passant de positif à négatif, si on change la valeur du voltage dans les différents terminaux. Le système est donc très prometteur pour pouvoir mesurer la corrélation positive induite par la présence du supraconducteur. Très récemment la conductance croisée dans ce système a été mesurée [Russo *et al*, Phys. Rev. Lett. **95**, 027002 (2005)]. Dans le même type d'échantillon les corrélations croisées peuvent être mesurés et nos prédictions vérifiées.

B-VIII. Transition entre jonction Josephson 0 et jonction π

(Pistolesi)

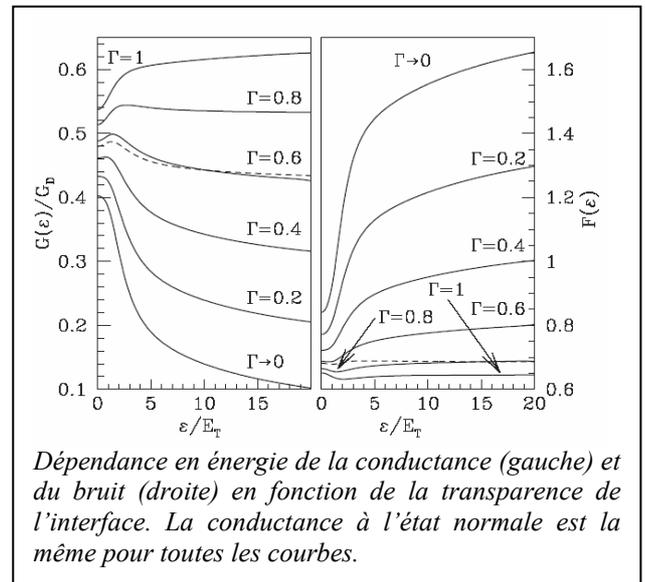
Collaboration externe : M. Houzet (CEA), V. Vinokur (Argonne National Lab, USA)

Si deux supraconducteurs sont mis en contact à travers une barrière tunnel et un courant passe à travers la jonction, la différence de phase φ entre les deux supraconducteurs est liée au courant par la relation $I(\varphi) = I_c \sin(\varphi)$. Or dans les années quatre-vingt déjà A. I. Buzdin, *et al.* [A. I. Buzdin, *et al.* JETP Lett. **35**, 178 (1982)] avait prédit qu'il est possible de créer des jonctions avec une relation de phase du type : $I(\varphi) = I_c \sin(\varphi + \pi)$. Ces jonctions sont appelées jonctions π , et elles constituent un dispositif très intéressant du point de vue fondamentale et applicatif. La réalisation des jonctions π est possible en intercalant une couche ferromagnétique entre les supraconducteurs. La réalisation expérimentale est très récente [V. V. Ryazanov *et al.* Phys. Rev. Lett. **86**, 2427 (2001) et T. Kontos *et al.* Phys. Rev. Lett. **89**, 137007 (2002)]. Le dispositif montre une transition entre le comportement 0 et le comportement π en fonction de l'épaisseur de la couche ferromagnétique ou de la température si l'épaisseur est bien choisie. Dans ce dernier cas on peut étudier en détail la transition de l'état 0 à l'état π . Dans certains échantillons autour de la transition on observe des indications qu'il existe une région dans laquelle la relation de phase est super harmonique $I(\varphi) = I_2 \sin(2\varphi)$ [H. Sellier *et al.* Phys. Rev. B **68**, 054531 (2003)]. Il y a d'autres phénomènes qui peuvent simuler un comportement de ce type. Il est donc important de donner un support théorique à cette observation. Malheureusement, il était difficile de vérifier si ces mesures étaient en accord avec la théorie standard pour décrire des supraconducteurs ferromagnétiques, parce que déjà les prévisions pour la première composante donnaient des valeurs au moins 10 fois plus grandes de celles observées. La raison pour ce désaccord est la présence d'un fort désordre magnétique dans les échantillons. Nous avons donc généralisé la théorie pour le tenir en compte. Nous avons pu obtenir un bon accord pour la première composante, et nous avons trouvé que la valeur mesurée pour la deuxième composante est compatible avec la théorie. De cette façon nous avons aussi pu expliquer pourquoi seulement dans certains cas cette composante était observée.

B-IX. Nano-électromécanique

(Pistolesi)

Collaboration externe R. Fazio (ENS Pise).

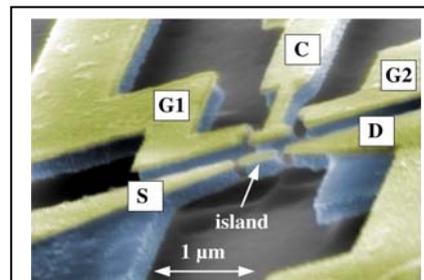


Depuis fin 2003 F. Pistoiesi a aussi une activité de recherche en nano-électro-mécanique. Ce sujet est très porteur en ce moment, et les perspectives expérimentales sont très excitantes. Pour l'instant l'activité s'est concentré sur la proposition du groupe de Chalmers [L.Y. Gorelik *et al.*, Phys. Rev. Lett. **80**, 4526 (1998)] de réaliser une « navette » qui pourrait transporter des électrons. Se basant sur le principe de la sonnette de Benjamin Franklin et sur le blocage de Coulomb, ce groupe a démontré qu'un petit grain conducteur qui peut osciller entre des contacts gardés à une différence de potentielle constante, devient mécaniquement instable et commence à osciller. A chaque oscillation, le grain fait passer un nombre donné d'électrons à la foi, d'où le nom de « navette » de charge. La réalisation expérimentale est très proche, les exemples les plus prometteurs semblent les nano piliers en silicium [D.V. Scheible et R.H. Blick, App. Phys. Lett. **84**, 4632 (2004)] ou les molécules de C^{60} [H. Park *et al.*, Nature **407**, 57 (2000)].

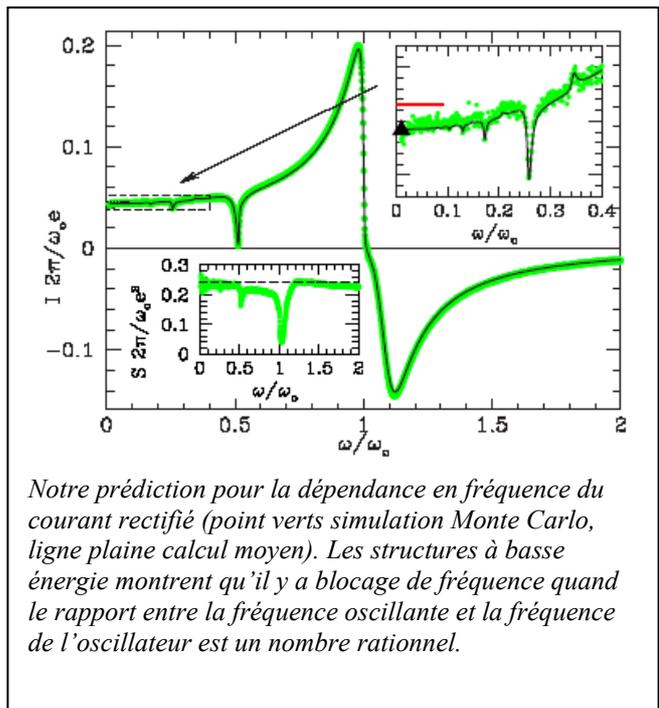
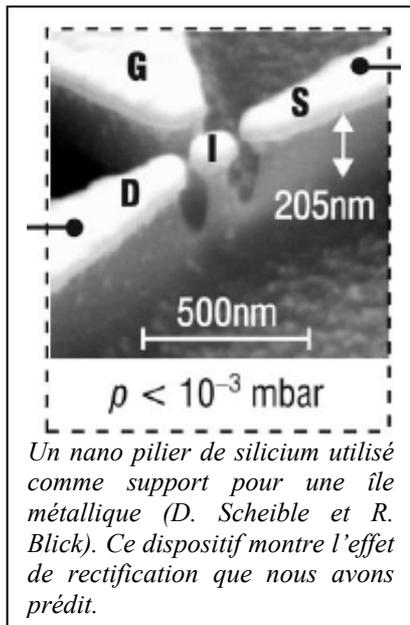
Statistique de transfert de charge dans une navette de charge : (F. Pistoiesi)

La navette de charge représente un nouveau genre de transport de charge. Il est donc important de le caractériser le mieux possible. Pour décrire de façon complète le transport il faut connaître non seulement le courant moyen, mais aussi le bruit et tous les moments d'ordre supérieur. Cela est équivalent à connaître la probabilité que dans un temps de mesure donné un nombre N d'électrons soit transmis à travers la structure. Notre travail a été le premier étude de statistique complète pour un système nanomécanique. Nous avons considéré le cas d'une oscillation d'amplitude constante et déterminé la statistique complète de comptage pour la navette de charge en fonction des taux de transfert tunnel, et de l'amplitude d'oscillation. De façon assez surprenante, on trouve que la probabilité est très asymétrique autour de la valeur plus probable. Effectivement le mécanisme physique pour faire passer plus d'électrons que la moyenne est différent du mécanisme pour faire passer moins d'électrons que la moyenne. Très récemment un groupe de Copenhague a confirmé ses résultats et il a généralisé cette approche en incluant la fluctuation de l'amplitude d'oscillation.

La navette de charge comme un rectificateur nanomécanique : (F. Pistoiesi en collaboration avec R. Fazio de l'Ecole Normale Supérieure de Pise) nous avons considéré l'effet d'une tension de biais alterné dans une navette de charge. Le système possède effectivement une fréquence propre de résonance à la quelle il peut osciller, si la dissipation est suffisamment faible. Le mécanisme proposé par le groupe de Chalmers prévoit que l'occupation électronique du grain change avec le temps de façon à extraire de l'énergie de la tension appliquée, et générer une force effective oscillatoire sur le grain. La présence d'une autre fréquence mène à des nouveaux effets. En particulier le système est non linéaire de façon intrinsèque, cela n'est pas lié à la force de rappel mécanique, mais à la dépendance exponentielle de la position du taux de transfert. Nous avons trouvé que si le système est asymétrique, un voltage purement alterné génère un courant continu : la structure se comporte comme un rectificateur de courant. Cet effet vient d'être observé par un groupe allemand [D.V. Scheible et R.H. Blick, App. Phys. Lett. **84**, 4632 (2004)].



*Navette de charge actionné par un voltage de grille (entre G1 et G2). L'île oscille et les électrons passent de S à D transporté dans l'île. Le courant dépend donc linéairement de la fréquence d'oscillation [Erbe *et al.*]*



B-X. Atomes froids et nanograins supraconducteurs

(Schuck, Hekking)

Collaboration externe M. Urban

Nos activités récentes se sont concentrées sur la description des nano-grains supraconducteurs et les atomes froids dans les pièges magnéto-optiques. Concernant la seconde partie, surtout les atomes fermioniques dans l'état superfluide ont été considérés. Leurs excitations rotationnelles et vibrationnelles ont été étudiées. Quant aux nanograins, ce sujet a été traité avec l'Hamiltonien d'appariement multi-niveaux de Richardson. Des approches purement quantiques mais également semiclassiques ont été développées.

Nous avons également étudié l'augmentation de l'appariement dans un système fermionique mésoscopique. Nous avons supposé que l'approche BCS est valable et que le potentiel d'interaction est indépendant de la taille finie du système. Nous avons étudié différents systèmes comme des grains et des couches supraconducteurs ainsi que des noyaux atomiques. Nous avons démontré que l'augmentation de l'appariement est due en partie à la présence d'une surface ; un bon accord est trouvé entre nos résultats et des expériences sur les noyaux et les nanograins d'aluminium.

B-XI. Systèmes à impuretés magnétiques ; effet Kondo

(Salomez, Simon)

Les énormes progrès expérimentaux survenus ces deux dernières décennies dans le domaine de la nanophysique et plus particulièrement, l'étude des propriétés de transport des systèmes méso- ou nanoscopiques, ont suscité un grand engouement pour ce nouveau domaine de recherche. A cette échelle de longueur, les interactions électroniques, la cohérence quantique et le désordre jouent un rôle prépondérant et donnent lieu à de nombreux phénomènes subtils. Nos recherches se concentrent sur l'étude du transport dans des boîtes quantiques semi-conductrices, sorte d'atomes artificiels dans lesquelles un faible nombre d'électrons ont été piégé électrostatiquement. Lorsque le nombre d'électrons est impair, la boîte se comporte comme une impureté magnétique artificielle. Les électrons de conduction des réservoirs vont chercher à faire écran à cette impureté; cela donne lieu à l'effet Kondo, un des paradigmes de la matière condensée. Au cours des dernières années, nous avons étudié différents effets Kondo dans un environnement mésoscopique.

Effet Kondo dans un environnement mésoscopique de taille finie

Collaboration: I. Affleck (UBC, Vancouver), O Entin-Wohlmann et A. Aharony (Univ. Tel Aviv), D. Feinberg (LEPES, Grenoble)

A très basse température, l'impureté est écrantée. Dans des systèmes mésoscopiques, la taille de ce nuage d'écran devrait être de l'ordre du micron. Néanmoins, ce "nuage Kondo" est fortement controversé car jamais observé expérimentalement. Lorsqu'une impureté est couplée à des réservoirs soit de taille finie ou bien ayant une densité d'états structurée (non uniforme), l'écrantage de l'impureté sera affectée lorsque la taille du nuage devient de l'ordre du réservoir, ce qui est concevable dans ces systèmes. C'est par exemple le cas d'une boîte quantique couplée aux

réservoirs par l'intermédiaire de fils quantiques de taille finie ou bien d'une boîte couplée à un grain métallique de taille finie. Cette situation pourrait également se rencontrer expérimentalement dans le cas d'une boîte insérée dans un interféromètre de type Aharonov-Bohm. Nous avons étudié dans ces différents cas comment l'extension finie du nuage d'écran devrait affecter les propriétés de transport et thermodynamiques.

Systèmes à plusieurs impuretés magnétiques

Collaboration: R. Lopez (Univ. des Baléares, Y. Oreg, Institut Weizmann, L. Szunyogh et G. Zarand (univ. Budapest), B. Lasarovitz (univ. Vienne)

Les progrès expérimentaux dans les fabrication des hétérostructures semi-conductrices permettent l'étude de systèmes à plusieurs boîtes quantiques et donc de petits réseaux d'impuretés artificielles. Couplées à un bain d'électrons de conduction, les impuretés magnétiques interagissent via un couplage de type RKKY au signe aléatoire. Deux impuretés peuvent préférer se mettre dans un état singulet ou triplet. Nous avons étudié pour un système à deux impuretés la compétition entre l'interaction de type RKKY, l'effet Kondo et un champ magnétique et montré que le champ magnétique peut induire un nouvel effet Kondo à deux impuretés donc non local. J'ai également étudié comment cette compétition est affectée dans un environnement de taille finie.

Les progrès récents dans les techniques de type STM permettent la (nano-)manipulation d'adatoms sur une surface métallique et la création d'amas d'impuretés métalliques (voir Figure ci-dessous). Les données expérimentales obtenues par la STM relèvent l'existence d'une structure dans la densité locale d'état uniquement pour certains types d'amas. Nous avons étudié la physique d'un amas de trois impuretés magnétiques sur une surface d'Or et donné une interprétation quantitative simple des expériences.

Effets Kondo orbital et applications

Collaboration: D. Feinberg (LEPES, Grenoble), K. Le Hur (Univ. Sherbrooke, Canada), R. Lopez et D. Sanchez (Univ. des Baléares), M-S. Choi (Univ. Séoul)

La physique Kondo repose sur l'existence de deux états dégénérés couplés à un bain d'électrons de conduction. Pour la boîte quantique, nous avons présenté le cas de deux états de spin sur un même niveau orbital. Mais on peut également imaginer deux états orbitaux dégénéré avec le même spin. On a alors à faire à un effet Kondo de charge qui est *a priori* réalisé dans un grain métallique couplé à un réservoir d'électrons. Une physique très riche en découle lorsque l'on couple effet Kondo de charge et effet Kondo de spin avec notamment un enchevêtrement non local entre ces deux degrés de libertés. On peut d'ailleurs utiliser cette propriété d'enchevêtrement cohérent pour manipuler le spin à partir de degrés de liberté purement orbitaux. A partir de cette idée, nous avons proposé un filtre à spin et un bi-polariseur à spin (voir figure ci-jointe) dans lequel un courant non polarisé est décomposé en deux courants polarisés de direction opposés. D'autres portes quantiques peuvent être réalisées sur le même principe.

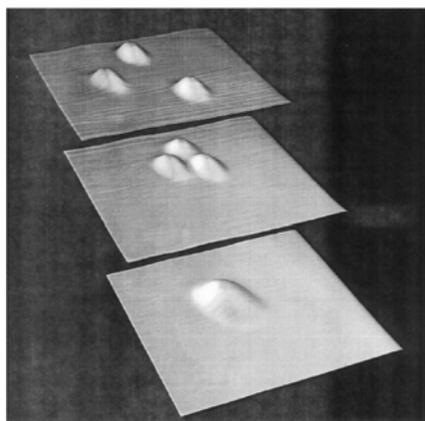
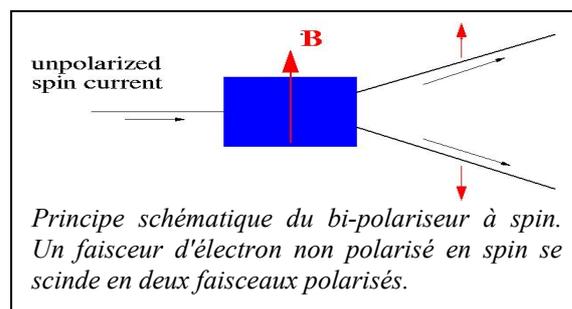


Image topographique montrant le rapprochement de trois adatoms de Chrome sur une surface d'Or pour former un cluster non résolu.



Effet Kondo et décohérence

Collaboration: D. Feinberg (LEPES, Grenoble), L. Borda et G. Zarand (univ. Budapest)

Les effets Kondo orbitaux ou de charge décrits ci-dessus sont difficiles à observer expérimentalement. Une explication possible est que les degrés de liberté de charge peuvent décohérer à cause des fluctuations du circuit électrostatique environnant qui peut se caractériser par une impédance. Nous avons étudié en détail la compétition entre l'effet Kondo de charge et les fluctuations de l'environnement dans le cas Ohmique (l'impédance est une résistance) et montré l'existence d'une transition de phase quantique. Cette étude a par la suite été étendue à différents effets Kondo, y compris l'effet Kondo "standard" de spin, en présence d'une impédance de circuit.

C. Ondes en Milieu Complexe 2002-2005

Chercheurs:

Sergey SKIPETROV (CR)
Bart VAN TIGGELEN (DR, responsable)
Roger MAYNARD (PR)
Domitille ANACHE (thésarde)
Bernard KAAS (thésard, Amsterdam, en co-tutelle)
Felipe PINHEIRO (thésard)

Visiteurs :

Vincent ROSSETTO (postdoc)
Michel CAMPILLO (PR, accueilli en délégation CNRS)

Etudiants encadrés :

Fabrice COCHET (Magistère 2^{ème} année), *Transfert de l'information à travers un milieu désordonné* (Skipetrov).
Julien JOURDAIN (Magistère 1^{ère} année), *Diffusion multiple des ondes en milieux complexe* (Skipetrov).
Timothé KOURIBA (M1 UJF), *Physique et théorie de l'information* (Skipetrov).
David BAINES (M1 UJF), *Localisation d'Anderson* (Skipetrov)
Abelin KAMENI (M2 Bordeaux 1), *Mésoscopie des ondes sismiques : Opérateur de couplage modale* (Tiggelen).
An GHYSELS (M2 Gant), *Mésoscopie des ondes sismiques : Analyse de la phase aléatoire* (Tiggelen)
Domitille ANACHE (M2 ENS Lyon) *Mésoscopie des ondes sismiques : influence de la température sur la coda* (Tiggelen).

Participation dans des GDR :

GDR 2253, Imagerie, Communication et Désordre (IMCODE)
GDR 2426, Physique quantique mésoscopique

Préambule :

Ces dernières années, l'équipe a initié et développé un renouveau des concepts de base de la diffusion multiple des ondes, aussi bien électroniques, optiques ou micro-ondes, qu'ultrasonores, ou sismiques, avec un esprit très interdisciplinaire et des collaborations locales, nationales et internationales. De nombreux articles ont été publiés en collaboration avec d'expérimentateurs, et il faut avant tout insister sur l'activité impressionnante – en recherche et en organisation - de Sergey Skipetrov depuis son arrivée en tant que CR2 en 2001.

Depuis 2003, le GDR IMCODE (« Imagerie, Communication et Désordre ») siège au LPMMC, avec une animation importante par l'équipe « Ondes ». De nombreux échanges et collaborations de l'équipe se sont déroulés soutenu par le GDR, dont une Ecole Thématique CNRS/OTAN organisée par Skipetrov et Van Tiggelen en 2002 à Cargèse, et un colloque « Mésoscopie Electronique et Photonique » à Orsay en 2005, organisé en commun avec le GDR « Mésoscopie Quantique », animé entre autre par l'équipe « Mésoscopie » au LPMMC. Une nouvelle Ecole Thématique en 2006 est en préparation. Pendant deux ans l'équipe a accueilli Michel Campillo, professeur de géophysique à l'Université de Grenoble, qui était en délégation CNRS. En 2004, Vincent Rossetto a passé 4 mois en tant que postdoc dans l'équipe. Il est ensuite parti continuer ses recherches à Dresde, et la bonne nouvelle est qu'il sera de retour début 2006 en tant que CR2. Felipe Pinheiro a préparé une thèse de très bonne qualité sur les simulations numériques des systèmes chiraux ou localisés. Il a soutenu en novembre 2003 à l'Université Joseph Fourier et est rentré au Brésil. Roger Maynard a été élu à la tête de la Société Française de Physique en 2005, en obtenant en même temps le statut de professeur émérite à l'Université Joseph Fourier. En 2004, Bart van Tiggelen a été nommé dans la section 05 du Comité National. Coté distinctions, notons l'attribution de la médaille d'argent 2004 du département SDU à Michel Campillo, ainsi que le Prix Anatole et Suzanne Abragam 2002 de l'Académie des Sciences et le Prix Paul Langevin 2005 de la SFP à Bart van Tiggelen.

Depuis 2004 la thèse de Bernard Kaas est en codirection avec le professeur Lagendijk, qui a reçu la médaille d'Or néerlandais en 2003. En septembre 2005 une nouvelle doctorante de l'ENS de Lyon, Domitille Anache, a été recrutée dans l'équipe. Elle travaillera sur la mésoscopie des ondes sismiques, en co-tutelle avec Ludovic Margerin, CR1 au Laboratoire de Géophysique à Grenoble. Le poste postdoctoral, attribué par le SPM au LPMMC en 2004, a été offert à Andreas Lubatch de l'Université de Bonn. A partir du 1^{er} octobre 2005 il travaillera avec nous sur l'effet laser en milieu aléatoire. Philippe Roux, CR1 et ancien membre du Laboratoire Ondes et Acoustique à l'ESPCI, s'est mobilisé à Grenoble à 2005, avec l'intention de monter une collaboration interdisciplinaire avec le Laboratoire de Géophysique et l'équipe « Ondes ». On travaillera ensemble – théoriquement et expérimentalement - sur la mésoscopie des ondes acoustiques et sismiques, soutenu par un « Plan Pluri Formation » et des crédits du CNRS. Enfin, Anna Munguzzi, recrutée en tant que CR2 par la section 06, sera accueillie au LPMMC le 1^{er} octobre 2005. Avec un projet innovateur sur les atomes froids elle fera une interface entre les équipes « ondes » et « mésoscopie ».

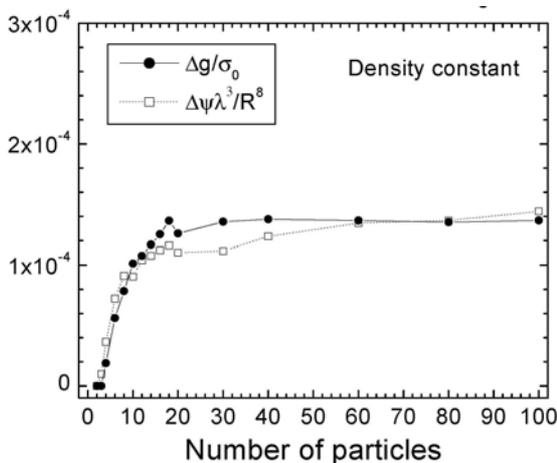
C-I. Magnéto-optique

(Pinheiro, Van Tiggelen)

Collaboration externe : Geert Rikken, Voislav Krstic (LCMP-Toulouse)

La chiralité moléculaire a été modélisée par un ensemble de N particules dipolaires classiques. Ce modèle permet d'inclure les effets magnétiques d'une façon simple, en attribuant aux dipôles une polarisabilité contenant l'effet Faraday. Ensuite, la diffraction de la lumière peut être calculée de façon « ab initio » en diagonalisant une matrice $3N \times 3N$ (le facteur 3 venant de la polarisation optique). La chiralité apparaît pour $N > 3$. Une grande question ouverte est de trouver un paramètre d'ordre *scalaire* qui quantifie la chiralité de la molécule. Une théorie de groupe, développée par Tom Lubensky en 1998, en propose un. On a démontré que la section efficace magnéto-optique, qui est linéaire au champ magnétique externe et forcé un pseudo scalaire, est directement proportionnelle au paramètre de Lubensky. On peut donc « quantifier » la chiralité par la diffraction optique.

Dans un deuxième temps le transfert radiatif a été étudié analytiquement dans un milieu aléatoire contenant des diffuseurs chiraux ou magnéto-chiraux. Un libre parcours chiral a été proposé qui quantifie l'impact de la chiralité sur la marche aléatoire des photons.



Diffraction de lumière par une molécule idéalisée. Comparaison de la diffraction magnéto-chirale Δg et le paramètre d'ordre chiral $\Delta \Psi$ proposé par Lubensky (Rev. Mod. Phys. 71, 1999), en fonction du nombre de dipôles N . Les calculs ont été effectués sur le cluster PHYNUM au LPMC. (Pinheiro et Van Tiggelen, Physical Review E 2004)

Felipe Pinheiro a soutenu la thèse à l'Université Joseph Fourier le 28 novembre 2003, et est rentré au Brésil depuis.

En 2004, une publication par A. Feigel apparaît (Phys. Rev. Lett 92, 020404), avec la conclusion que les fluctuations du vide dans un milieu « bi-anisotrope » magnétoélectrique peuvent induire une quantité de mouvement non nulle de la matière. Dans le New York Times on parle même d'une « *momentum from nothing* ». Un milieu magnétoélectrique, décrit par une contribution $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{B}$ à l'indice de réfraction optique, ressemble conceptuellement à un milieu magnéto chirale, et voilà pourquoi cette publication a été pour nous une bonne occasion de reprendre les études. En collaboration avec l'équipe de Rikken à Toulouse, on a falsifié les calculs de Feigel (Comment PRL). Soutenu par un projet de l'Agence Spatiale Européenne, qui avait également constaté les conclusions surprenantes et controverses, on a développé une théorie de champs pour l'effet « Feigel ». Notre conclusion est que l'effet « Feigel » n'existe pas dans un milieu homogène et infini. Par contre, dans la géométrie de Casimir (deux plaques métalliques séparées par du vide), il existe.

C-II La localisation forte d'Anderson

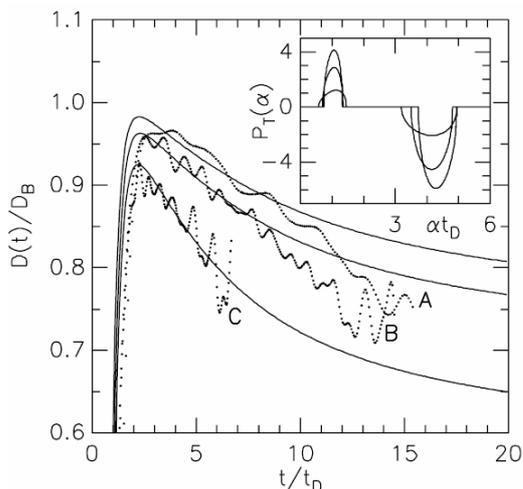
(Skipetrov, Van Tiggelen, Pinheiro)

Collaboration externe: Arkadiusz Orłowski and Marian Rusek (Varsovie)

Dans les milieux fortement désordonnés on s'attend à un nouveau régime de propagation d'ondes qui a été découvert pour la première fois par Philip Anderson en 1958. La « localisation d'Anderson » est un phénomène ondulatoire commun aux ondes classiques et aux particules quantiques (électrons, par exemple). Il consiste à une suppression de la propagation par le désordre. En optique l'observation de ce phénomène constitue un véritable défi car le degré de désordre nécessaire est très difficile à atteindre.

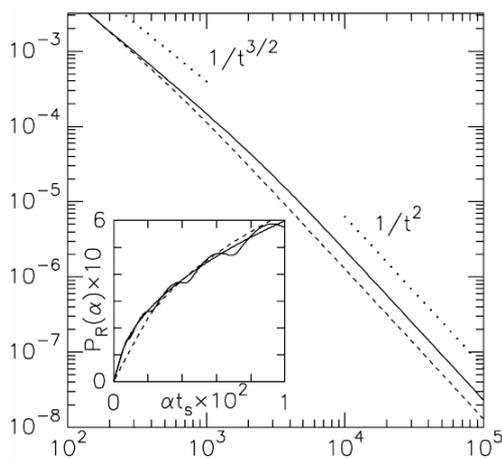
Nous avons développé une version de la théorie autoconsistante de localisation initialement proposée par Vollhardt et Wölfle au début des années 1980. La théorie prévoit une équation de diffusion pour la fonction de Green de

l'intensité où le coefficient de diffusion n'est plus constant (comme dans le cas du « faible » désordre) mais dépend de la fréquence et de la position dans le milieu. Ce coefficient de diffusion est déterminé par la solution d'une équation de diffusion de façon auto-consistante. Nous avons appliqué notre approche théorique pour expliquer les



Temps de propagation

Coefficient de diffusion $D(t)$ des photons en fonction du temps. Sa dépendance temporelle est un signe de la localisation faible. La théorie (lignes) [Skipetrov et Van Tiggelen, *Phys. Rev. Lett.* 2004] est en bon accord avec les données obtenues par l'équipe de A. Genack [Chabanov *et al. Phys. Rev. Lett.* **90**, 203903 (2003)]



Temps de propagation

Coefficient de réflexion $R(t)$ des photons par un milieu localisé et semi infini. La figure montre une transition entre le comportement diffus $R(t) \sim 1/t^{3/2}$ le comportement localisé $R(t) \sim 1/t^2$ pour les temps longs. Ce résultat est en accord avec la prédiction de la théorie de matrices aléatoires [Titov et Beenakker, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3388 (2000)].

résultats expérimentaux très récents sur la transmission de courtes impulsions à travers un guide d'ondes désordonné (expérience conduite par l'équipe de Prof. Genack à *Queens College à New York*). Nos résultats sont en bon accord avec les expériences (Figure) ainsi qu'avec les résultats de calculs indépendants utilisant d'autres méthodes. Contrairement aux autres théories, notre approche a pu être appliquée aux milieux 3D. En régime de localisation d'Anderson on prévoit une décroissance non exponentielle de la transmission en temps et une nouvelle loi $1/t^2$ pour la réflexion (Figure). Ces deux prédictions théoriques restent à vérifier expérimentalement. Dans tous les cas (guide d'ondes, milieu 3D) on s'attend à ce que les effets de localisation se manifestent pour les temps t élevés.

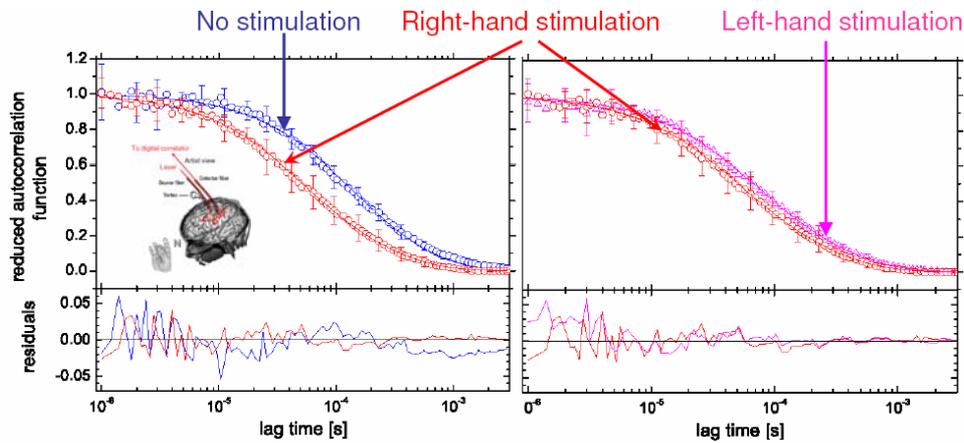
Dans le cadre de sa thèse, Felipe Pinheiro a effectué des simulations numériques « ab-initio » de la localisation forte de la lumière, en utilisant un logiciel développée par Orlowski et Rusek à Varsovie. La simulation consiste à diagonaliser une matrice complexe symétrique, et à chercher les N valeurs propres dans le plan complexe. Les fonctions propres de cette matrice représentent physiquement des états « localisés ». Leur partie imaginaire Γ , toujours positive, implique une fuite d'énergie suite au couplage avec l'extérieur. Plus la fuite est faible, plus l'état est localisé : c'est le critère célébré de Thouless. La théorie de super-symétrie a fait une prédiction très précise sur la distribution de fuite $P(\Gamma)$: elle doit être log-normale pour les toutes petites fuites « les états prélocalisés », et varier comme $1/\Gamma$ pour les fuites plus élevées. On a vérifié numériquement cette prédiction.

C-III Spectroscopie des ondes diffusées pour l'imagerie du cerveau humain

(Skipetrov)

Collaboration externe : Georg Maret et Thomas Gisler (Université de Konstanz, Allemagne)

La *spectroscopie des ondes diffusées* (« diffusing-wave spectroscopy », DWS) est une technique qui permet d'étudier la dynamique des milieux hétérogènes multi diffuseurs (suspensions, gels, mousses, etc.) en mesurant la corrélation temporelle de la lumière diffusée. En collaboration avec le *Laboratoire de Matière Molle* dirigé par Prof. Georg MARET (l'Université de Konstanz, Allemagne), nous avons réussi à montrer que la DWS peut être utilisée comme un outil de recherche médicale dans le domaine de l'imagerie de l'activité cérébrale. En utilisant la faible absorption de la lumière en infrarouge proche (longueur d'onde ~ 800 nm) par les tissus biologiques, on peut sonder l'activité du cerveau humain de façon non invasive par les moyens optiques utilisés à travers la peau et le crâne. Les mesures de la corrélation temporelle de la lumière diffusée permettent de détecter et de caractériser l'activité cérébrale de façon complètement non invasive (Figure).



Fonction d'autocorrélation de l'intensité mesurée lorsque le patient droitier effectue des mouvements avec les doigts de sa main droite (figure à gauche, ligne rouge) ou n'effectue aucun mouvement (figure à gauche, ligne bleue). On voit clairement que la fonction d'autocorrélation décroît plus vite dans le premier cas. Si les mouvements sont effectués par les doigts de la main gauche, l'effet est moins fort (figure à droite, ligne pourpre). La correspondance entre la théorie (lignes continues) et les données (symboles) est très bonne, et permet une caractérisation quantitative de l'activité cérébrale (Dietsche, Skipetrov, Maret et. al. J. of Biomedical Optics, 2005).

C-IV Sismologie

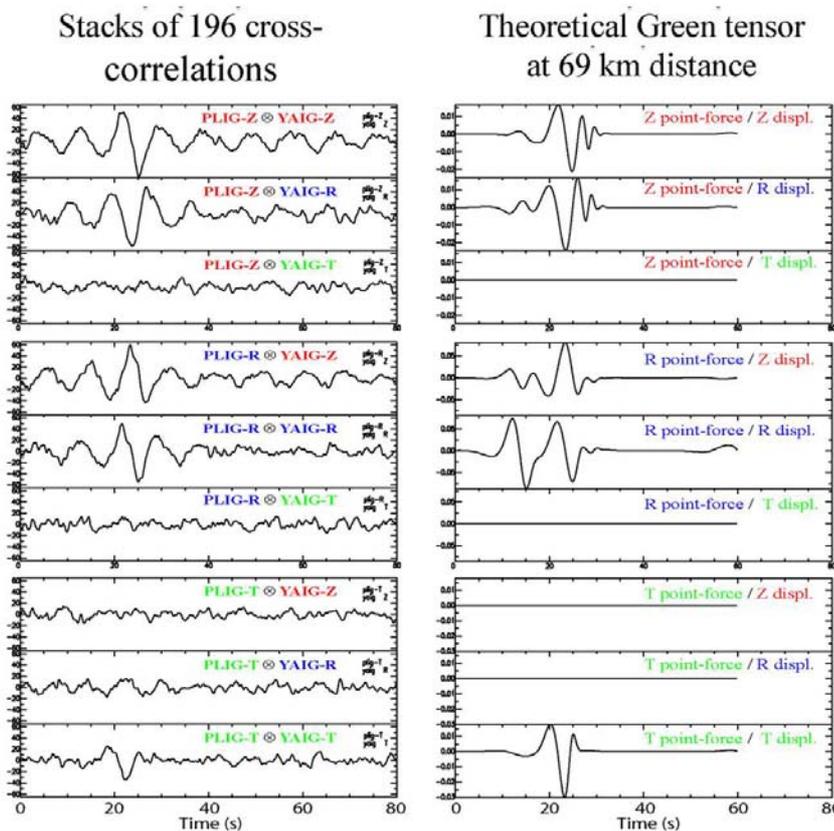
(Campillo, Van Tiggelen)

Collaboration externe: Ludovic Margerin (LGIT-Grenoble), Eric Larose (thésard, LGIT), Richard Weaver (Urbana-Champaign).

Un grand défi est de mener une physique « mésoscopique » à l'échelle terrestre. On cherche à démontrer l'existence de la diffusion multiple des ondes sismiques, ainsi que la pertinence des phénomènes « mésoscopiques » tels que la localisation faible, le renversement du temps, les tavelures et les corrélations,.... Ce projet est soutenu par une ACI « jeunes chercheurs », un PPF local, un contrat CNRS/NSF avec le professeur Weaver à Urbana-Champaign et le laboratoire de Géophysique de Grenoble (CNRS/UJF) . En 2005, trois stagiaires « Master 2 » ont été accueillis au LPMMC sur la thématique de la mésoscopie des ondes sismiques.

Avec ses collaborateurs, Campillo a démontré la possibilité d'observer des ondes sismiques *directes*, en utilisant une source « passive », c'est-à-dire du bruit ou la coda d'une source lointaine, comme il a été déjà démontré en helio-sismologie dans les années 80. Son principe est basé sur une généralisation du théorème de fluctuation-dissipation, et la méthode a évoqué une petite révolution en imagerie sismique, avec beaucoup de perspectives et de questions ouvertes.

La technique d'imagerie passive a été étudiée numériquement dans des milieux ouverts et diffusants. Nous avons montré qu'en effectuant une moyenne sur les sources, les corrélations du champ convergent exactement vers la fonction de Green entre les deux points de mesure. Une interprétation physique de ce principe a été proposée, elle est basée sur une analogie rigoureuse entre les corrélations de champs et le retournement temporel des ondes. Cette interprétation a permis d'expliquer divers phénomènes : La symétrie temporelle des corrélations : elle dépend d'une part de la distribution des sources par rapport au couple de capteurs passifs, ainsi que du degré d'hétérogénéité du milieu, d'autre part de la fenêtre temporelle utilisée lors de la corrélation. La diffusion multiple aide à reconstruire la fonction de Green entre deux points par corrélation, car les diffuseurs agissent comme des sources secondaires. L'efficacité de la reconstruction augmente avec le nombre de sources employées (rôle de la moyenne sur les sources). La possibilité existe de corréler uniquement le signe des formes d'ondes (corrélation 1-bit). Une étude plus approfondie du phénomène d'asymétrie temporelle des corrélations a été menée. Des simulations numériques ont permis de vérifier quantitativement le rôle de la position des sources et de la diffusion dans la restauration de la symétrie temporelle. Ces observations numériques ont été confirmées par le traitement de coda sismique acquise en Alaska.

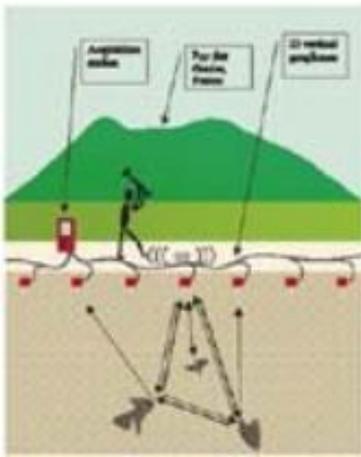


Comparaison entre la matrice de corrélation temporelle du champ élastique $\langle u_i(-t/2) u_j(+t/2) \rangle$ (soit neuf composants de polarisation) de la coda sismique et la fonction de Green théorique. (Campillo et Paul, Science, 2003).

Parallèlement nous avons analysé des enregistrements de coda sismique. Un premier essai avec des données Mexicaines (Campillo et Paul, 2003) a montré que la fonction de Green pouvait effectivement être partiellement extraite de la coda après calcul de moyenne sur un ensemble de séismes. Nos analyses ont permis de reconstruire la part des ondes de surface sans ambiguïté. L'application de cette approche aux données d'une expérience en Alaska a permis de confirmer ces conclusions et de faire une analyses détaillée de la convergence de la reconstruction et du caractère asymétrique de la fonction reconstruite (Paul et al., 2005). Nous avons pu interpréter ces résultats théoriquement à partir des analyses de Lobkis et Weaver (2001), Derode et al. (2003) et van Tiggelen (2003). Le régime pertinent pour les ondes de la coda sismique tardive est bien celui de la diffraction multiple et de la diffusion mais pour des temps où, bien que les rapports d'énergie sont stabilisés, le caractère anisotrope du champ est encore très marqué. Cette anisotropie rend nécessaire une moyenne de la corrélation sur un grand ensemble de source. Cette nouvelle approche est déjà testée par plusieurs équipes aux Etats-Unis et au Japon, de même que son développement avec le bruit sismique.

Enfin, le principe de corrélation d'ondes diffuses s'applique de façon équivalente au champ aléatoire constituant le bruit sismique. En effet le bruit sismique enregistré en permanence aujourd'hui représente une source de données extrêmement abondante. Nous avons mesuré du bruit sismique par corrélation de longues fenêtres d'enregistrement. Cette nouvelle méthode nous a permis la première tomographie 'passive' avec une application en Californie qui a révélé des détails de structure qui ne pouvaient être détectés par des méthodes traditionnelles d'imagerie par ondes de surface.

Les premières expériences mésoscopiques ont été effectuées avec le matériel fourni par les crédits ACI. En septembre 2003 une expérience en Auvergne a, pour la première fois, révélé la rétrodiffusion cohérente des ondes sismiques. Les résultats ont été publiés dans les *Physical Review Letters* avec la photo (Figure) sur la couverture. En 2005, une expérience de spectroscopie des ondes diffuses (fréquence kHz) a démontré la sensibilité de la coda sismique aux variations de température. Une publication est en préparation. C'était également le premier exercice de Domitille Anache, qui vient de s'installer dans notre équipe en tant que thésarde/moniteur ENS Lyon. Eric Larose a soutenu la thèse de doctorat en juillet 2005 (directeur de thèse : Michel Campillo), et est parti aux Etats-Unis pour effectuer un stage postdoctoral dans l'équipe de Weaver.



Rétrodiffusion cohérente avec les ondes sismiques en Auvergne. Couverture de *Physical Review Letters* 93(5). (Larose, Margerin, Van Tiggelen et Campillo).

C-V Ondes en milieu désordonné et non linéaire

(Skipetrov, Maynard)

Collaboration externe : Evguenii Makeev (Université de Moscou, Russie)

En considérant la propagation des ondes en milieu désordonné avec une non linéarité cubique (non linéarité de type Kerr : indice de réfraction proportionnel à l'intensité lumineuse), nous avons étudié la stabilité des solutions stationnaires (intensité indépendante du temps) par rapport à de faibles excitations périodiques. La stabilité du système par rapport à ces excitations peut être caractérisée par l'exposant de Lyapunov qui devient positif au-delà d'un certain seuil. Notre calcul montre que la dynamique spontanée du système au-delà du seuil est vraisemblablement chaotique (et non pas périodique). Ce résultat reste à vérifier expérimentalement car l'instabilité du speckle en milieu désordonné et non linéaire n'a encore jamais été observée, malgré quelques efforts à Paris (Claude BOCARRA) et à Nice (Patrick SEBBAH).

Un autre phénomène bien connu dans le cadre de l'optique non linéaire est la génération d'harmoniques et, notamment, de la deuxième harmonique. Nous avons étudié ce phénomène dans des suspensions de particules sphériques, où la symétrie centrale du matériau interdit la génération de la deuxième harmonique dans le volume de particules. Le processus non linéaire n'est possible qu'à la surface des particules où cette symétrie est brisée. Pour une particule de taille nanométrique le ratio surface/volume peut être important est donc les effets de surface sont à prendre en compte. La conclusion principale de notre étude est que l'intensité de la deuxième harmonique augmente linéairement avec l'épaisseur de l'échantillon du au phénomène de « l'accord stochastique de phases » ou « random phase matching » (Figure) : les ondes générées dans différentes parties du milieu s'ajoutent de façon incohérente (c'est-à-dire sans relation de phases précise) à la sortie de l'échantillon. L'accord stochastique de phases dans les matériaux polycristallins a été récemment mis en évidence par Baudrier-Raybaut *et al.* [*Nature* **432**, 374 (2004)].

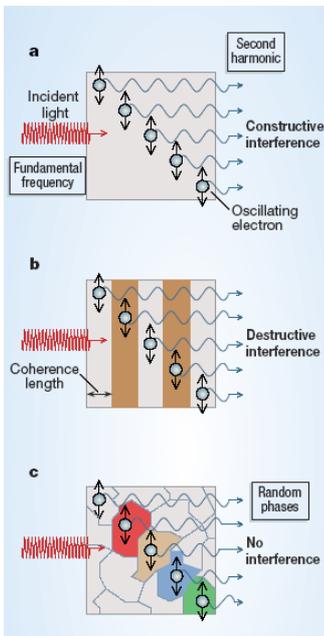


Illustration de l'accord stochastique de phases dans un matériau polycristallin. (a). Dans un cristal non linéaire où la vitesse de propagation de l'onde fondamentale (fréquence ω) est égale à celle de l'onde de la deuxième harmonique (fréquence 2ω), l'accord de phase est parfait et les ondes 2ω générées dans différentes parties de l'échantillon s'ajoutent en phase (interférence constructive), ce qui permet une conversion très efficace de l'énergie de l'onde fondamentale à l'énergie de l'onde de la deuxième harmonique. (b). Dans la plupart des matériaux, les vitesses des ondes ω et 2ω sont différentes. Alors, l'accord de phase est absent et les ondes générées dans des couches successives d'épaisseur égale à la longueur de cohérence l_{coh} (typiquement, $l_{\text{coh}} \sim 1-100 \mu\text{m}$) interfèrent de façon destructive. Pour un échantillon d'épaisseur $L > l_{\text{coh}}$, l'intensité de la deuxième harmonique est au mieux égale à celle d'un échantillon de taille $L = l_{\text{coh}}$ et le transfert de l'énergie vers la deuxième harmonique n'est pas efficace. (c). Dans un polycristal désordonné, les phases des ondes générées dans différentes parties de l'échantillon sont aléatoires. Ces ondes se rajoutent alors de façon incohérente et l'intensité de la deuxième harmonique est proportionnelle au nombre de domaines cristallins ou encore à l'épaisseur de l'échantillon [Skipetrov, Nature 2004].

C-VI Physique des Ultrasons

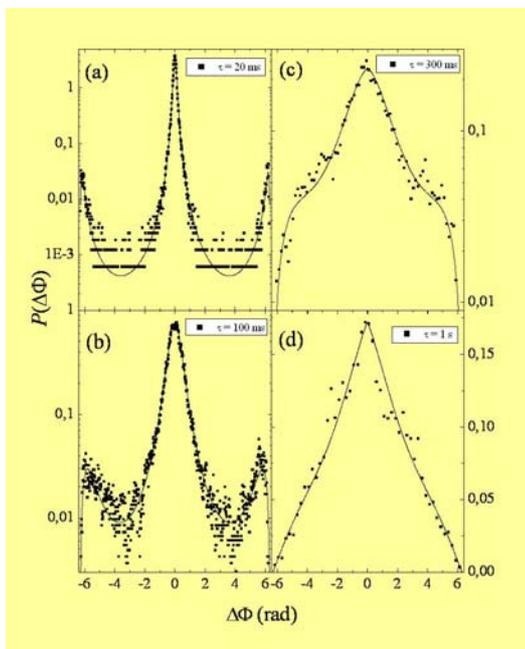
(Van Tiggelen)

Collaboration externe : Mathias Fink, Julien De Rosny, Arnaud Tourin (LOA-Paris), John Page (Winnipeg-CA), John Scales and Alison Malcolm (Colorado School of Mines)

Depuis des années déjà des collaborations fructueuses existent avec la communauté des ultrasons. D'un côté c'est très utile pour soutenir nos activités en sismologie, les expériences en échelle réduite étant toujours plus contrôlables et moins difficiles. De l'autre côté, les expériences ultrasonore permettent une confrontation avec de nouvelles théories développées par nous.

En collaboration avec l'équipe de John Scales, professeur au Colorado School of Mines, une expérience ultrasonore a été menée dans du granite. On a démontré que les ondes ultrasonores obéissent à l'équation de diffusion. On a vérifié la possibilité de faire de l'imagerie passive avec les ondes multiples diffusées, tel qu'elle a été faite avec la coda sismique. L'équipartition en espace de phase, qui se met en place de fur et à mesure, explique pourquoi la fonction de corrélation du champ élastique est symétrique en temps. En 2005, Alison Malcom a soutenu sa thèse sur cette problématique.

Julien De Rosny et Arnaud Tourin ont initié une étude à la fois diagrammatique et expérimentale pour établir un lien entre le renversement temporel et la rétrodiffusion cohérente. Van Tiggelen avait déjà établi ce genre de lien (Physical Review Letters, 2004) qui a fait appel à une machine à renversement temporel cachée dans une demie espace désordonnée. Les études de Rosny et Tourin, auxquelles on a légèrement contribué, ont démontré que l'auto-focalisation spatiale est doublée lorsque source, machine et récepteur sont confondus.



Mesures de la distribution statistique de la variation de la phase ultrasonore dans un milieu diffusant et dynamique, après quatre temps différents. Les courbes représentent la prédiction théorique, basée sur la statistique gaussienne. (John Page et Bart van Tiggelen, soumis à Phys. Rev. Lett.)

Depuis quelques années déjà, on travaille avec John Page, professeur à Winnipeg. Il a passé une année sabbatique au LOA (ESPCI) en 2004. L'enjeu est de mesurer et de modéliser la statistique de la phase complexe des ondes ultrasonores qui ont été diffusées dans un échantillon de billes de verre. En utilisant la statistique gaussienne du champ complexe on peut aller très loin mathématiquement. Par exemple, on a réussi à calculer la distribution de probabilité de la première et de la deuxième dérivée temporelle de la phase, ainsi que la variance de la phase cumulative. La confrontation avec les expériences est toujours en cours et les premiers résultats sont très satisfaisants (Figure). Un papier est en rédaction.

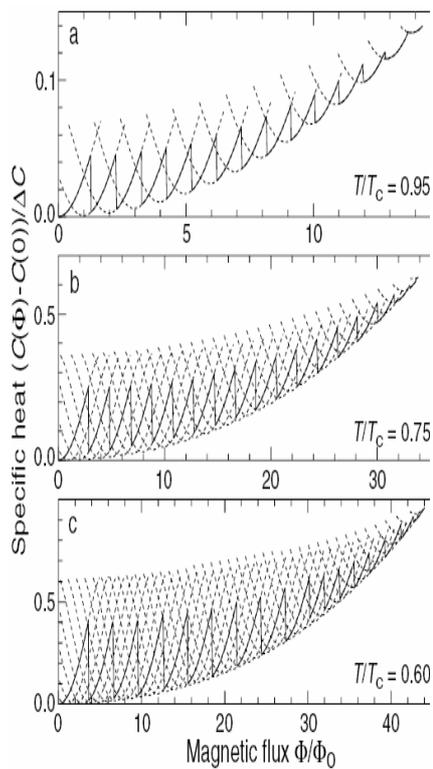
Avec l'équipe de Fink au LOA on a étudié – théoriquement et expérimentalement – l'effet tunnel acoustique dans un matériel phononique à bande interdite (« phononic bandgap material »), fourni par John Page. Notamment, on a étudié le temps de retard des ondes soumises à l'effet tunnel. Une publication est parue dans Europhysics Letters.

C-VII Thermodynamique de systèmes mésoscopiques

(Skipetrov)

Collaboration externe : Olivier Bourgeois et Jacques Chaussy (CRTBT, Grenoble)

La physique mésoscopique de systèmes électroniques (métaux et supraconducteurs) étudie les propriétés de petits échantillons dont la taille (typiquement, dizaines de nanomètres) est comparable à la longueur de cohérence des électrons et pour lesquels les phénomènes d'interférences quantiques sont d'une importance considérable. Pour le fonctionnement correct de futurs dispositifs nanométriques il est extrêmement important de comprendre les phénomènes d'échauffement, de refroidissement et de dégagement de chaleurs dans de tels systèmes. En collaboration avec Olivier Bourgeois au *Centre de Recherches sur les Très Basses Températures* (CNRS, Grenoble) nous avons étudié la chaleur spécifique d'un anneau supraconducteur en aluminium sous champ magnétique. La chaleur spécifique montre un comportement très irrégulier lorsque l'on varie le champ magnétique (Figure). Ce comportement irrégulier est une conséquence directe des phénomènes d'interférences quantiques et constitue, en fait, la première mise en évidence de l'influence de phénomènes de cohérence de phase sur les propriétés thermodynamiques des objets mésoscopiques.



Chaleur spécifique C d'un anneau supraconducteur de taille $\sim 1 \mu\text{m}$ et comparable à la longueur de cohérence supraconductrice ξ . C varie périodiquement en fonction du flux magnétique Φ à travers l'anneau. Lorsque l'on baisse la température, la période de cette variation change de Φ_0 (a) à $2\Phi_0$ (b) et puis à $3\Phi_0$ (c), où Φ_0 est le quantum de flux. Les discontinuités de C que l'on voit sur la figure correspondent aux transitions de phase entre les états supraconducteurs avec un nombre différent de vorticités magnétiques dans l'anneau. Lorsque l'on augmente Φ , les vorticités entrent dans l'anneau un par un. (a), par deux (b) ou par trois (c). Pour les champs magnétiques supérieurs à un certain valeur critique ($\Phi_c = 14\Phi_0$ (a), $\Phi_c = 34\Phi_0$ (b), $\Phi_c = 44\Phi_0$ (b)), l'état supraconducteur est détruit. Le calcul a été effectué en utilisant la théorie de Ginzburg-Landau et décrit bien les observations sur les anneaux en aluminium. [Bourgeois, Skipetrov et. al., Phys. Rev. Lett 2005]

C-VIII Speckle et interférences mésoscopiques

(Van Tiggelen, Skipetrov)

Collaboration externe : Ad Lagendijk, Bernard Kaas (Amsterdam), Patrick Sebbah (LPMC-Nice), Azriel Genack (Queens College –New York City), Andrey Chabanov (University of Texas)

Une expérience a été menée par l'équipe de Azriel Genack, professeur distingué au City University de New York, sur les fluctuations universelles des micro-ondes. Ces fluctuations sont bien connues en électronique, mais sont difficiles à mesurer avec les différentes ondes classiques. Elles ont été mesurées en optique par l'équipe de Georg Maret à Constance. Suite à un calcul de Nicolas Trégourès (soutenu en 2001) on a eu l'idée de mesurer les tavelures de micro-ondes, ainsi que leurs corrélations spectrales, en polarisation croisée, ce qui supprime les autres tavelures. Après une série d'expériences longue et difficile, une publication est parue dans le Physical Review Letters.

Les effets de la localisation faible se manifeste dans la contribution de longue portée à la corrélation spatiale de l'intensité diffusée (corrélation dite « C_2 ») qui croît au cours du temps. Le modèle théorique que nous avons développé décrit bien les mesures de C_2 par Chabanov *et al.* [Phys. Rev. Lett. **93**, 123901 (2004)]. Une conclusion importante qui sort de nos calculs est que les expériences dynamiques sont beaucoup mieux adaptées à l'étude de la localisation d'Anderson car ils permettent de mesurer la dépendance des effets de localisation en temps, ce qui apporte bien plus d'informations que les mesures stationnaires.

Depuis 2004, la thèse de Bernard KAAS est en co-direction avec le professeur Ad Lagendijk, qui a reçu la médaille d'Or aux Pays-Bas en 2003. Le défi théorique est de décrire la rétrodiffusion cohérente en milieu désordonné et anisotrope, guidé par les expériences optiques déjà menées à Amsterdam en utilisant des poudres semi-conductrices. Mr. Kaas a été accueilli un mois au LPMMC.

En 2005 Van Tiggelen et Skipetrov ont repris l'étude théorique de la tavelure dite « C_0 ». Cette tavelure a été prédite en 1999, et elle avait déjà été étudiée par Skipetrov et Maynard en 2000. C'est une tavelure « non gaussienne », provoquée par des diffuseurs qui sont tout près de la source, et d'une portée spatiale infinie. Elle n'a jamais été confirmée par les expériences, non seulement puisqu'elle est de faible amplitude, mais surtout parce que personne n'a jamais clarifié la bonne variable à mesurer, comme par exemple la conductance dans le cas des tavelures type C_3 . La nouvelle théorie montre que la densité locale des états n'est que sensible à C_0 . On espère que cette prédiction simplifiera sa confirmation expérimentale, notamment en sismologie.

C-IX Transfert d'information en milieu désordonné

(Skipetrov, Maynard)

Dans beaucoup d'applications (téléphonie portable, communications sous-marines, imagerie médicale, etc.) les ondes (micro-ondes, lumière, ondes sonores ou ultrasonores, etc.) portent l'information. En même temps, les milieux de propagation de ces ondes sont souvent désordonnés, ce qui empêche, à première vue, le bon transfert de l'information. Motivés par les travaux récents de physiciens de Bell Labs aux Etats-Unis [Moustakas *et al. Science* **287**, 287 (2000) ; Simon *et al. Physics Today* **54**(9), 38 (2001)], nous avons étudié la capacité d'un canal de communication entre deux réseaux bien éloignés d'antennes, chaque réseau étant composé de n antennes placées en ligne. Les principaux résultats de cette étude sont les suivants :

- La capacité de communication dépend sensiblement des corrélations entre les fonctions de Green G_{ik} décrivant la propagation d'ondes entre l'émetteur k et le capteur i
- La capacité augmente linéairement avec le nombre d'antennes n , contrairement au cas d'un milieu homogène où l'augmentation de la capacité ne varie que logarithmiquement. La capacité d'un canal désordonné peut donc dépasser la capacité d'un canal homogène si n est suffisamment grand
- Il existe un espacement optimal d'antennes qui maximise la capacité de communication pour un rapport signal/bruit donné

D. Informatique au LPMMC 2002-2005

Responsable : F. Berthoud (IR)

D-I Bilan informatique

Systeme d'information

Ces dernières années ont été marquées par quelques évolutions majeures

- le réseau de notre laboratoire est passé au Gigabit, ce qui nous permet d'avoir une bande passante confortable entre nos serveurs de fichiers et de sauvegarde et les serveurs de calcul (Gigabit de bout en bout !). L'architecture du réseau n'a pas été modifiée en profondeur : nous disposons d'un réseau laboratoire et d'un réseau dédié aux invités. Les éléments passifs du réseau de la maison des magistères ainsi qu'une partie des éléments actifs et le câblage ont été complètement renouvelés en 2005. Toutes les dépenses engagées dans ce cadre l'ont été par le CNRS d'une part et l'Université Joseph Fourier d'autre part. Le Centre de Ressources Informatique de l'UJF a déployé un réseau sans fils pour l'ensemble de la maison des magistères. Nous envisageons au cours de la prochaine année, le déploiement d'un second réseau sans fils destiné aux invités de passage. A moyen terme, nous envisageons de protéger l'accès au réseau par un mécanisme d'authentification (802.1X) afin de nous mettre en conformité avec les demandes du ministère.
- L'architecture système du laboratoire a suivi l'évolution des matériels, systèmes et logiciels. Les mécanismes d'authentification des utilisateurs sont centralisés, nous avons mis en place les outils nécessaires à une bonne gestion informatique : gestion de la base de données des matériels, gestion des prêts de matériel, système de helpdesk, mise en place d'outils collaboratifs, gestion des sauvegardes, etc. Les clients déployés pour les utilisateurs sont sous XP ou linux, les serveurs sont sous linux. Les mises à jour sécurités de l'ensemble des postes sont automatiques.
- La sécurité physique des serveurs a été renforcée par le déménagement de l'ensemble des serveurs dans une salle dédiée, ondulée, climatisée et fermée.
- Concernant l'accès aux logiciels commerciaux scientifiques, nous avons poursuivi l'installation de logiciels sur des serveurs dédiés au laboratoire. Plus récemment, nous avons initié une réflexion au niveau de tout le site du polygone du CNRS pour partager l'accès à un serveur de licence afin d'améliorer le service aux utilisateurs tout en réduisant les coûts. Ce projet a été mis en place et est en exploitation depuis quelques mois.
- Enfin, nous proposons aux utilisateurs du laboratoire un accès à quelques « petits » serveurs de calcul pour des besoins ponctuels et peu gourmand en ressources.

Calcul Haute Performance

Le LPMMC, au travers de nombreux projets scientifiques, s'est engagé depuis plusieurs années dans le développement du calcul haute performance. Initialement au sein du laboratoire en se dotant de moyens de calcul significatifs pour l'époque (dans les années 1990), le laboratoire a rapidement ouvert ses « portes numériques » à des utilisateurs externes qui ne disposaient pas des ressources nécessaires. Au début des années 2000, l'engagement du laboratoire a largement dépassé le seuil du polygone du CNRS en proposant à la communauté des physiciens de Grenoble (physique de la matière condensée) une plateforme de calcul haute performance dans le cadre général du projet CIMENT (projet CPER 2000-2006). Le pôle PHYNUM, animé scientifiquement par Alain Pasturel et techniquement par Françoise Berthoud s'est doté de ressources de calcul

- en 2002 : une plateforme de 40 biprocesseurs athlon, dotés chacun de 3 Go de mémoire. Ce cluster a permis au laboratoire ID de promouvoir le middleware mandrake-clic développé en collaboration avec la société MandrakeSoft. Ce calculateur a donné lieu à environ 30000 h de calcul et est encore utilisé.
- En 2004 : une plateforme de 32 processeurs itanium (medetphy : 2 machines altix 350), soit un total de 64 Go de mémoire, particulièrement bien adaptée aux calculs nécessitant une grande quantité de mémoire et/ou des communications MPI (ou OpenMP) intense en fréquence et débit. Cette plateforme est exploitée par la communauté des biologistes, des physiciens et par quelques utilisateurs de CIMENT (en particulier de l'observatoire). Cette plateforme a donné lieu à une vingtaine de publications et un certain nombre de résultats très significatifs qui n'auraient pas pu être obtenu à partir des calculateurs nationaux.
- En 2006, les budgets résiduels de l'opération CIMENT devraient nous permettre de mettre à niveau la plateforme medetphy (altix).

Nous avons intégré ces ressources matérielles dans la grille de calcul Grenobloise, CiGRI (ACR GRID). Nous avons participé au développement et à l'exploitation de cette grille de calcul. Quelques utilisateurs ont ainsi pu bénéficier des ressources ponctuellement inutilisées de nos plateformes de calcul.

Pour les années futures, nous envisageons d'intensifier nos efforts en direction de la communauté des physiciens de la matière molle (Laboratoire de Spectrométrie Physique) et en direction du déploiement des Middleware grille de calcul.

Parallèlement à l'exploitation et à l'optimisation de ces ressources matériels et logiciels, nous nous sommes très fortement engagés dans le soutien et la formation aux utilisateurs.

D-II Rapport d'activité Françoise Berthoud

Ce rapport ne reprend pas les activités d'« administrateur systèmes et réseaux » que j'exerce dans le cadre du LPMMC, mais l'ensemble des actions que j'ai développées au niveau régional, national et dans le cadre d'une collaboration scientifique depuis 2002.

Activités autour du calcul scientifique : Projet Phynum-CIMENT

Dès 1998, je me suis très fortement engagée, aux cotés de Alain Pasturel, dans la création d'un pôle mésoinformatique, ayant pour but de promouvoir la simulation numérique pour la physique des matériaux dans le contexte de la communauté *CIMENT* Grenobloise (pôles méso-informatiques). Ceci a abouti à la création du pôle *PHYNUM*, qui est aujourd'hui un des six pôles du projet *CIMENT*. J'en assure la responsabilité technique. Dans ce cadre, ma mission est triple :

- **Activité technique et administrative** : après avoir procédé à l'analyse des besoins et à son achat, j'administre un cluster de 40 bi-athlon (200 k€ HT) qui est utilisé à plus de 80% de ses ressources depuis maintenant plus de 3 ans. En 2004, les pôles « biologie » et « physique » de *CIMENT* se sont associés pour acquérir un ordinateur nouvelle génération. Je suis également responsable technique de ce projet (200 k€ HT). J'ai procédé à un achat dans le cadre d'une procédure classique d'appel d'offre (analyse des besoins, tests sur différentes architectures, élaboration d'un CCTP, analyse des offres) qui a abouti à l'acquisition des deux ordinateurs altix (SGI), dotés chacun de 16 processeurs itanium. En 2004 et 2005, j'ai également participé à la rédaction des CCTP (Cahier des Clauses Techniques Particulières) pour deux autres pôles de *CIMENT* pour lesquels une mise à jour était prévue. J'ai participé au dépouillement et à l'analyse des offres en soutien aux ingénieurs responsables techniques des pôles concernés.
- **Support de la recherche** : La communauté des utilisateurs du cluster de 40 bi-athlon se compose d'une vingtaine de permanents. Une dizaine de doctorants ont déjà pu soutenir leur thèse à partir des résultats acquis sur ce cluster. Mon rôle est d'aider les chercheurs et plus particulièrement les étudiants en thèse à la portabilité et à l'optimisation de leurs codes sur ce cluster. Ainsi à titre d'exemple, j'ai participé activement à la partie technique de la thèse d'Andrei Incze qui concernait la portabilité d'un code parallèle de dynamique moléculaire *ab initio*. Le nouveau ordinateur est d'ores et déjà intensément utilisé par une communauté élargie (physiciens, biologistes, astrophysiciens : une dizaine de permanents), ce qui a donné lieu à une douzaine de publications importantes en moins d'un an. Plus généralement, je rédige et mets en ligne les documentations nécessaires à une utilisation optimale de la plateforme, mets à jour les systèmes, surveille les aspects sécurité, applique les correctifs sécurité et installe régulièrement les logiciels applicatifs scientifiques nécessaires aux différentes communautés. Par la mise en place d'une charte d'utilisation, par une écoute attentive des besoins des différents utilisateurs, j'optimise l'utilisation des plateformes de calcul en fonction des projets de recherche en cours.
- **Activité d'animation et de formation** : J'ai porté un effort particulier à la diffusion des connaissances nécessaires pour une utilisation optimale de ces plateformes de calcul. Dans ce cadre, je me suis fortement impliquée dans l'organisation et la formation autour du calcul réparti : formation « Introduction au calcul réparti » module transversal du Collège Doctorale (depuis 2002), module « calcul réparti » dans le cadre de deux masters 2 « Ingénierie de la modélisation et simulation numérique », « Modèles et Instruments en Médecine et Biologie » à partir de 2004-05. Je participe, en tant que formateur (1 jour sur 5) à une université d'automne « Introduction au calcul scientifique » (oct 2003, sept 2004). Je co-organise pour l'automne 2005 une formation au contenu similaire dans le cadre de la formation permanente du CNRS.

Par ailleurs, je participe à un projet de **Grille de calcul** : Je collabore au projet *ACI* (Action Concertée Incitative) *GRID* « CiGri » (*CIMENT GRID*) qui vise à la construction d'une grille autour des plateformes *CIMENT*. L'objectif est le développement et l'installation de logiciels permettant le fonctionnement de la grille, puis la validation par des expérimentations sur applications scientifiques. (« A Grenoble Grid for Monte Carlo

Activités de coordination et d'animation technique régionale et nationale :

Au Niveau régional, j'ai développé des activités de coordination et d'animation en direction de la communauté des informaticiens systèmes et réseaux de l'environnement recherche/enseignement. Dans cet esprit, j'ai assuré entre 1999 et 2003 la mission de coordinateur sécurité informatique pour la délégation Alpes. Outre les aspects techniques, cette mission m'a apporté des compétences nouvelles autour des aspects organisationnels et de communication. Il m'est apparu, dans l'exercice de cette fonction, que la progression technique des informaticiens dans les laboratoires était fortement limitée par l'« isolement » des agents. Pour cette raison, j'ai souhaité développer un réseau (au sens d'un réseau-métier, réseau de compétences) sur Grenoble. Avec quelques autres administrateurs systèmes et réseaux, j'ai défini les objectifs du réseau *SARI* et a mis en œuvre depuis trois ans des actions en direction de cette communauté. Ce réseau rassemble aujourd'hui près de 180 personnes. Les actions régulièrement proposées (séminaires, formations, journées techniques, etc.), en concertation avec les *CRIs* des universités et des services de ressources humaines des différents établissements contribuent à créer des liens entre professionnels, à permettre les échanges de compétences et la mutualisation des savoirs. Cette année, dans le cadre du groupe de coordination que j'anime, j'ai fortement contribué à renforcer les actions de *SARI*, en particulier

- en proposant davantage de séminaires techniques
- en mettant en place une formule type atelier : Les ateliers *SARI* complètent la panoplie des lieux et modes d'acquisition des savoirs et savoir-faire par une approche technique concrète. Ils permettent aux *ASR* de mettre en oeuvre et prendre en main un service, un dispositif ou une procédure nouvelle pour eux, en bénéficiant de l'expertise d'un collègue : 2 ateliers ont été réalisés à ce jour.
- en initiant et en coordonnant une formation relativement lourde (12 intervenants, 4*4 jours de formation) : « parlez-vous réseau ? » (14 stagiaires)
- en proposant une formation à destination des informaticiens, pour améliorer la communication vers les utilisateurs (24 stagiaires).
- En participant à l'organisation d'une journée dédiée au métier d'*ASR*
- Etc...

Les actions de *SARI* à Grenoble font maintenant partie de la vie professionnelle des informaticiens systèmes et réseaux, Elles ont déjà contribué à renforcer le niveau global de technicité des informaticiens et à modifier l'organisation du travail de ces personnels.

Au niveau national, l'*UREC* (Unité des Réseau du CNRS) m'a confié, fin 2003, la mission d'évaluer la pertinence de fédérer les structures de même type (réseaux locaux) afin de proposer un projet de création de fédération de réseaux. Ce travail a abouti à la rédaction d'un texte fondateur qui décrit les objectifs et le fonctionnement de cette fédération : *RESINFO*. Lors de sa création, *RESINFO* incluait 7 réseaux régionaux ou de département scientifique, aujourd'hui *RESINFO* a impulsé la création de nouveaux réseaux régionaux et compte une dizaine d'entités. *RESINFO* est donc piloté par l'*UREC* et co-animée par un ingénieur de l'*UREC* et moi même. Pour cette année, les actions engagées par *RESINFO* concernent un travail pour améliorer la visibilité des formations proposés aux *ASR* (sur le plan national), l'accueil des nouveaux entrants *ASR* (bap E), la rédaction d'un guide destiné aux *ASR* pour rédiger leur rapport d'activité. Par ailleurs, un budget a été établi et permet de financer le fonctionnement courant des réseaux régionaux, voire les opérations exceptionnelles. Je participe activement à l'organisation nécessaire pour la mise en œuvre de ces actions. Par ailleurs, j'ai intégré le groupe de travail *REFERENS* (groupe de travail ministériel) pour la mise à jour des fiches métier de la bap E.

Référence bibliographique : « *RESINFO*, un réseau au cœur des réseaux », article soumis aux *JRES* (Journées Réseaux) 2005 et accepté.

Collaboration scientifique

Je participe à un programme de recherche intitulé "analyse spatiale de la diversité génétique", en collaboration avec Stéphanie Manel du LECA (Grenoble).

La préservation de la biodiversité est un enjeu majeur du XXIème siècle. La biodiversité a trois composantes: la diversité des écosystèmes, la diversité spécifique, et la diversité intraspécifique (ou génétique). C'est ce troisième aspect qui nous intéresse. Préserver cette diversité nécessite i) de mesurer cette diversité (par l'étude des génotypes multilocus ou des fréquences alléliques dans les populations), ii) d'étudier sa distribution dans l'espace iii) et de comprendre son évolution dans le temps. Notre travail de recherche vise à développer et valider des méthodes pour caractériser la distribution de la diversité génétique dans l'espace. Une des méthodes développée a fait l'objet d'un article soumis à la revue *Molecular Ecology*.

Je participe dans ce cadre à l'ACI IMP bio pour 3 ans (2004-2007) : «Analyse des données en génomique des populations », responsable: O. Gaggiotti, Professeur.

II.2 – Bilan quantitatif sur les quatre dernières années

II.2 - Bilan quantitatif sur les quatre dernières années

II.2.1 Articles dans des revues avec comité de lecture (ACL)

- 1) C. Berne, M. Sluiter et A. Pasturel, *Theoretical approach of phase selection in refractory metals and alloys*, J. of Compounds and Alloys **334**, 27 (2002).
- 2) C.Colinet et A. Pasturel, *Ab initio calculation of the formation energies of one dimensional long period structures in $TiAl_3$ compound*, Intermetallics **11**, 751 (2002).
- 3) L. Magaud, A. Pasturel et J.Y. Veuillen, *Instability of metallic In-Sn dimer lines on the Si(100) 2x1 surface*, Phys. Rev. B **65**, 245306 (2002).
- 4) C.Colinet et A. Pasturel, *Ab initio calculations of antiphase boundary energies in $TiAl_3$ compound*, J. Phys. Cond. Matter **14**, 6713 (2002).
- 5) C.Colinet et A. Pasturel, *Ab initio calculations of the stability of one dimensional long period structures in Cu_3Pd compound*, Phil. Mag. B **82**, 1067 (2002).
- 6) N. Capron, G. Boureau, J. Hafner et A. Pasturel, *Thermodynamic Properties of the Si-SiO₂ system*, J.Chem Phys. **117**, 1843 (2002).
- 7) A. Pasturel, C. Colinet, *First principles calculations of APBs in $(Ni, Pd, Pt)_3V$ compounds*, Phil. Mag. **82**, 1715 (2002).
- 8) An. Incze, P. Peyla et A. Pasturel, *Elastic interaction of oxygen atoms on a graphite surface*, Phys. Rev. B **66**, 172101 (2002).
- 9) C.Colinet et A. Pasturel, *Theoretical calculation of the Phase diagram between one-dimensional long-period structures in the quasi-binary sections: $Pd_{3x}Rh_{3(1-x)}V$, $Pt_{3x}Rh_{3(1-x)}V$ et $Pt_3V_xTi_{(1-x)}$* , Calphad **26**, 563 (2002).
- 10) M. Sluiter, A. Pasturel et Y. Kawazoe, *Site Occupation in the Ni-Nb μ phase*, Phys. Rev. B **67**, 174203 (2003).
- 11) An. Incze, C. Chatillon et A. Pasturel, *Oxidation of graphite by atomic oxygen : a first-principles approach*, Surf. Science **537**, 55 (2003).
- 12) T. Pagnier et A. Pasturel, *Ab initio Study of WO_3 under pressure*, J. Phys. Cond. Matter **15**, 3121 (2003).
- 13) G. Robert, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Structural Stability of $Pu_{(1-x)}M_x$ ($M=Al, Ga, In$)*, Phys. Rev. B **68**, 75109 (2003).
- 14) N. Jakse, L. Hennet, B. Glorieux, D.L. Price, M.L. Saboungi et A. Pasturel, *Structural changes on supercooling liquid silicon*, Applied Physics Lett. **83**, 4734 (2003).
- 15) N. Jakse et A. Pasturel, *Local Order of liquid and supercooled Zirconium by ab initio molecular dynamics*, Phys. Rev. Lett. **91**, 195501 (2003).
- 16) P. Peyla et C. Misbah, *Elastic Interaction between Defects in Thin and 2D Films*, European Physical Journal B **33**, 233 (2003).
- 17) G. Robert, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Calculated Thermodynamic Properties of Plutonium metal*, J. Phys. Cond. Matter **15**, 8377 (2003).
- 18) G. Robert, C. Colinet, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Chemical Short Range Order effects on stability in $\delta Pu_{1-x}Ga_x$ alloys*, Phil. Mag. B **84**, 1877 (2004).
- 19) L.Magaud, A. Pasturel et J.Y. Veuillen, *Electronic Properties of dispersive surface states in NiCu nanostructures on Cu (111) from ab initio calculations and STM experiments*. Europhys. Lett. **67**, 90 (2004).
- 20) N. Jakse et A. Pasturel, *Ab initio Molecular Dynamics Simulations of local structure of supercooled Nickel*, J. Chem. Phys. **120**, 6124 (2004).
- 21) G. Robert, C. Colinet, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Phase Stability in δPu -alloys : a key role of Chemical Short Range Order*, Mod. and Sim. in Mat. Sci. and Eng. **12**, 693 (2004).
- 22) O. Lebacqz, O. Bengone et A. Pasturel, *Impact on Electronic correlations on the structural stability, magnetism and voltage of $LiCoPO_4$ battery*, Phys. Rev. B **69**, 245107 (2004).
- 23) P. Deniard, A.M. Dulac, O. Lebacqz and A. Pasturel, *High Potential positive Materials for lithium-ion batteries*, J. of Phys. and Chem. of Solids **65**, 229 (2004)
- 24) G. Robert, C. Colinet, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Cohesive Properties of Pu-Ga alloys*, MRS **802**, DD64 (2004).
- 25) G. Robert, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Chemical Short Range Order in δPu -Ga alloys*, Actinide Lett. **1**, 3 (2004).
- 26) N. Jakse, O. Le Bacqz et A. Pasturel, *The structure of supercooled Ta liquid*, Phys. Rev. B **70**, 174203 (2004).
- 27) N. Jakse, O. Le Bacqz et A. Pasturel, *Ab initio Molecular Dynamics Simulations of Short-Range Order in liquid $Al_{80}Mn_{20}$ and $Al_{80}Ni_{20}$ alloys*, Phys. Rev. Lett. **93**, 207801 (2004).
- 28) An. Incze, P. Peyla et A. Pasturel, *Mechanical Properties of an idealized graphite Oxide*, Phys. Rev. B **70**, 212103 (2004).
- 29) O. Le Bacqz, A. Pasturel et O. Bengone, *First principles study of Phospho-Olivines as lithium storage electrodes*, Phil. Mag. **85**, 1747 (2005)

- 30) O. Le Bacq, A. Pasturel, D. Nunez et C. Lacroix, *First principles determination of exchange interactions in delafossite $YCuO_{2.5}$* , Phys. Rev. B **71**, 14432 (2005).
- 31) L. Magaud, G. Reinisch, A. Pasturel, P. Mallet et J.Y. Veullen, *Confinement of Bloch waves in YSi_2 nanostructures on Si (111)*, Europhys. Lett. **69**, 784 (2005).
- 32) M. Sluiter, A. Pasturel et Y. Kawazoe, *Prediction of Site Preference and Phase stability of Transition Metal based Frank Kasper phases*, In the Science of Complex Alloy Phases, ed. P. Turchi et Massalski, p. 409 (TMS, Warrendale, PA, USA) 2005.
- 33) G. Robert, B. Siberchicot et A. Pasturel, *Vacancies formation energies in δ -Plutonium*, Europhys. Lett. **71**, 412 (2005).
- 34) C. Colinet, W. Wolf, R. Podloucky et A. Pasturel, *Ab initio Study of the structural stability of $TiSi_2$ compound*, Appl. Phys. Lett. **87**, 41910 (2005).
- 35) N. Jakse, O. Le Bacq et A. Pasturel, *Chemical and Icosahedral SRO in liquid and undercooled $Al_{80}Mn_{20}$ and $Al_{80}Ni_{20}$ alloys*, J. Chem. Phys. **123**, 104508 (2005).
- 36) N. Jakse, O. Le Bacq et A. Pasturel, *Localized Magnetism in Liquid $Al_{80}Mn_{20}$ alloys: a first-principles Investigation*, Phys. Rev. Lett., accepté (2005).
- 37) N. Dupin, S. Fries; B. Sundman, M. Sluiter et A. Pasturel, *Using first-principles results to calculate finite temperature properties of the Nb-Ni μ phase*, Phil. Mag. (accepté).
- 38) N. Jakse, O. Le Bacq et A. Pasturel, *Temperature dependence of the SRO in liquid and undercooled $Al_{80}Mn_{20}$ alloys*, J. Phys. Cond. Matter (accepté).
- 39) N. Jakse, O. Le Bacq et A. Pasturel, *Short range Order of Liquid and Supercooled Metals*, J. Non Cryst. Solids (accepté).
- 40) P. Barberis, N. Dupin, C. Lemaignan et A. Pasturel, *Microstructure and Phase control in Zr-alloys : Thermodynamic and Kinetic aspect*, ASTM (accepté).
- 41) O. Le Bacq, G. Lucazeau et A. Pasturel, *Modelling the crystal-amorphous phase transition of $Eu_2(MoO_4)_3$* , Phys. Rev. B (accepté).
- 42) F. Faure and B. Zhilinskii, "Topological Chern indices in molecular spectra" Physical Review Letters, **85**, 960-963, (2001).
- 43) F. Faure and B. Zhilinskii "Topological properties of the Born-Oppenheimer approximation and implications for the exact spectrum" Lett. in Math. Physics, **55**, 219-238, (2001).
- 44) F. Faure "Propagating modes in a periodic wave guide in the semi-classical limit". J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 1339-1356, (2002).
- 45) F. Faure and B. Zhilinskii, "Topologically coupled energy bands in molecules" Phys. Lett. A, **302**, 242-252, (2002).
- 46) F. Faure, S. Nonnenmacher and S. De Bièvre, "Scarred eigenstates for quantum cat maps of minimal periods" Communications in Math. Physics, **239**, 449 - 492 (2003).
- 47) F. Faure and S. Nonnenmacher, "On the maximal scarring for quantum cat map eigenstates" Communications in Math. Physics, **245**, 201 - 214, (2004).
- 48) A. Ratchov, F. Faure and F. W. J. Hekking, "Loss of quantum coherence in a system coupled to a zero-temperature environment", Eur. Phys. J. B **46**, 519-528 (2005).
- 49) O. Buisson, F. Balestro, J. P. Pekola, and F. W. J. Hekking, One-shot quantum measurement using a hysteretic dc SQUID, Phys. Rev. Lett. **90**, 238304 (2003).
- 50) R. Fazio, F. W. J. Hekking, and J. P. Pekola, Measurement of coherent charge transfer in an adiabatic Cooper-pair pump, Phys. Rev. B **68**, 054510 (2003).
- 51) Ya. M. Blanter and F. W. J. Hekking, Supercurrent in long SFFS junctions with antiparallel domain configuration, Phys. Rev. B **69**, 024525 (2004).
- 52) J. P. Pekola, T. T. Heikkilä, A. M. Savin, J. T. Flyktman, F. Giazotto, and F. W. J. Hekking, Limitations in cooling electrons using normal-metal-superconductor tunnel junctions, Phys. Rev. Lett. **92**, 056804 (2004).
- 53) J. Claudon, F. Balestro, F. W. J. Hekking, and O. Buisson, Coherent oscillations in a superconducting multi-level quantum system, Phys. Rev. Lett. **93**, 187003 (2004).
- 54) I.S. Beloborodov, A.V. Lopatin, F.W.J. Hekking, R. Fazio, and V.M. Vinokur, Thermal transport in granular metals, Europhys. Lett. **69**, 435 (2005).
- 55) J. Dietel, L. I. Glazman, F. W. J. Hekking, and F. von Oppen, Microwave photoconductivity of two-dimensional electron systems with unidirectional periodic modulation, Phys. Rev. B **71**, 045329 (2005).
- 56) J. M. Kivioja, T. E. Nieminen, J. Claudon, O. Buisson, F. W. J. Hekking, and J. P. Pekola, Observation of transition from escape dynamics to underdamped phase diffusion in a Josephson junction, Phys. Rev. Lett. **94**, 247002 (2005).
- 57) J. M. Kivioja, T. E. Nieminen, J. Claudon, O. Buisson, F. W. J. Hekking, and J. P. Pekola, Weak coupling Josephson junction as a current probe: effect of dissipation on escape dynamics, New Journal of Physics **7**, 179 (2005).
- 58) C. Biagini, R. Ferone, R. Fazio, F.W.J. Hekking, and V. Tognetti, Superconducting Fluctuation Corrections to the Thermal Current in Granular Metals, à paraître dans Phys. Rev. B.

- 59) J.G. Hirsch, A. Mariano, J. Dukelsky, P. Schuck, Fully Self-Consistent RPA description of the many level pairing model, *Ann. Physics* **296**, 187 (2002).
- 60) M. Urban, P. Schuck, X. Vinas, Thomas-Fermi approximation to static vortex states in superfluid trapped atomic gases, *Eur.Phys. J. D* **27**, 147 (2003).
- 61) M. Farine, F.W.J. Hekking, P. Schuck, X. Vinas, Generic finite size enhancement of pairing in mesoscopic Fermi systems, *Phys. Rev. B* **68**, 024507 (2003).
- 62) M. Urban and P. Schuck, Slow rotation of a superfluid trapped Fermi gas, *Phys. Rev. A* **67** 033611 (2003).
- 63) A. Storozhenko, P. Schuck, J. Dukelsky, G. Roepke, and A. Vdovin, Pair fluctuations in ultra-small Fermi systems within Self-Consistent RPA at finite temperature, *Ann. Physics* **307**, 308 (2003).
- 64) H. Yabu, Y. Takayama, T. Suzuki, P. Schuck, Atomic Bose-Fermi mixed condensates with Boson-Fermion quasi-bound cluster states, *Nucl. Phys. A* **738**, 273 (2004).
- 65) M. Jemai, P. Schuck, J. Dukelsky, R. Bennaceur Self-Consistent Random Phase Approximation - Application to the Hubbard Model for Finite Number of Sites. *Phys. Rev. B* **71**, 1 (2005).
- 66) A. Storozhenko, P. Schuck, T. Suzuki, H. Yabu, J. Dukelsky Boson-Fermion pairing in a Boson-Fermion environment cond-mat 0504226, à paraître dans *Phys Rev A*.
- 67) P. Simon et I. Affleck, *Kondo screening cloud effects in mesoscopic devices*, *Phys. Rev. B* **68**, 115304 (2004).
- 68) K. Le Hur, P. Simon and L. Borda, *Maximized Orbital and Spin Kondo effects in a single-electron transistor*, *Phys. Rev. B* **69**, 045326 (2004).
- 69) D. Feinberg, P. Simon, *Splitting electronic spins with a Kondo double dot device*, *Applied Physics Letters* **85**, 1846 (2004).
- 70) R. Lopez, D. Sanchez, M. Lee, M.-S. Choi, P. Simon, K. Le Hur, *Probing spin and orbital Kondo effects with a mesoscopic interferometer*, *Phys. Rev. B* **71**, 115312 (2005).
- 71) P. Simon, R. Lopez and Y. Oreg, *RKKY and magnetic field interactions in coupled Kondo quantum dots*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 086602 (2005).
- 72) P. Simon, *Kondo screening cloud in a double-quantum dot*, *Phys. Rev. B* **71**, 155319 (2005).
- 73) B. Lazarovits, P. Simon, G. Zarand, L. Szunyoth, *Exotic Kondo from magnetic trimers*, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 077202 (2005).
- 74) L. Borda, G. Zarand, P. Simon, *Dissipation-induced quantum phase transition in a quantum box*, pour être publiée dans *Phys. Rev. B*
- 75) F. Pistolesi and Ph. Nozières, *Superconductivity with hard-core repulsion: BCS-Bose crossover and s-/d-wave competition*, *Phys. Rev. B* **66**, 054501 (2002).
- 76) Y. Hasegawa, R. Loidl, G. Badurek, M. Baron, N. Manini, F. Pistolesi, and H. Rauch, *Observation of off-diagonal geometric phase in polarized neutron interferometer experiments*, *Phys. Rev. A*, **65** 052111 (2002).
- 77) F. Pistolesi, G. Bignon, and F.W.J. Hekking, *Subgap noise of a superconductor-normal-metal tunnel interface*, *Phys. Rev. B* **69**, 214518 (2004).
- 78) M. Houzet and F. Pistolesi, *Energy dependence of noise in normal/superconducting metal junctions*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 107004 (2004).
- 79) F. Pistolesi, C. Castellani, C. Di Castro, and G.C. Strinati, *Renormalization Group Approach to the Infrared Behavior of the Zero-Temperature Bose System*, *Phys. Rev. B* **69**, 024513 (2004).
- 80) G. Bignon, M. Houzet, F. Pistolesi, and F.W.J. Hekking, *Current-current correlations in hybrid superconducting and normal metal multiterminal structures*, *EuroPhys. Lett.* **67**, 110 (2004).
- 81) F. Pistolesi, *Full counting statistics of a charge shuttle*, *Phys. Rev. B* **69**, 245409 (2004).
- 82) F. Pistolesi and R. Fazio, *The charge shuttle as a nanomechanical rectifier*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 036806 (2005).
- 83) J. Li, G. Dietsche, D. Iftime, S.E. Skipetrov, G. Maret, T. Elbert, B. Rockstroh, and T. Gisler, *Noninvasive detection of functional brain activity with near-infrared diffusing-wave spectroscopy*, *Journal of Biomedical Optics* **10**, 044002 (2005).
- 84) O. Bourgeois, S.E. Skipetrov, F. Ong and J. Chaussy, *Attojoule calorimetry of mesoscopic superconducting loops*, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 057007 (2005).
- 85) S.E. Skipetrov, *Enhanced mesoscopic correlations in dynamic speckle patterns*, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 233901 (2004).
- 86) S.E. Skipetrov, *Disorder is the new order* (« News and Views » section), *Nature* **432**, 285-286 (2004).
- 87) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, *Dynamics of weakly localized waves*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 113901 (2004).
- 88) S.E. Skipetrov, *Dynamic instability of speckle patterns in nonlinear random media*, *J. Opt. Soc. Am. B* **21**, 168-176 (2004).
- 89) F. Scheffold, S. Romer, F. Cardinaux, H. Bissig, A. Stradner, V. Trappe, C. Urban, S.E. Skipetrov, L. Cipelletti and P. Schurtenberger, *New trends in optical microrheology of complex fluids and gels*, *Progress in Colloid and Polymer Science* **123**, 141-146 (2004).

- 90) J. Li, G. Dietsche, G. Maret, T. Gisler, B. Rockstroh, T. Elbert, and S. E. Skipetrov, Measurements of human motor and visual activities with diffusing-wave spectroscopy, *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.* **5864**, 58640J (2005).
- 91) S.E. Skipetrov, Langevin description of speckle dynamics in nonlinear disordered media, *Phys. Rev. E* **67**, 016601 (2003).
- 92) S.E. Skipetrov, Information transfer through disordered media by diffuse waves, *Phys. Rev. E* **67**, 036621 (2003).
- 93) S.E. Skipetrov, Instability of speckle patterns in random media with noninstantaneous Kerr nonlinearity, *Optics Letters* **28**, 646-648 (2003).
- 94) E.V. Makeev and S.E. Skipetrov, Second harmonic generation in suspensions of spherical particles, *Opt. Commun.* **224**, 139-147 (2003).
- 95) S.E. Skipetrov, Temporal fluctuations of waves in weakly nonlinear disordered media, *Phys. Rev. E* **63**, 056614 (2001).
- 96) F. Scheffold, S.E. Skipetrov, S. Romer, and P. Schurtenberger, Diffusing-wave spectroscopy of nonergodic media, *Phys. Rev. E* **63**, 061404 (2001).
- 97) S.E. Skipetrov and M.A. Kazaryan, Diffusion-wave spectroscopy of light-induced fluxes, *Atmospheric and Oceanic Optics* **14**, 344-350 (2001).
- 98) R.Bressoux and R.Maynard Fluid Mechanics of Photonic Gas in Nonlinear Media, *Physica D* **163** 89, (2002).
- 99) R. Hennino, N. P. Trégoures, N.M. Shapiro, L. Margerin, M. Campillo, B.A. van Tiggelen and R.L. Weaver, Observation of Equipartition of Seismic Waves in Mexico, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3447 (2001).
- 100) B.A. van Tiggelen, L. Margerin and M. Campillo, Coherent Backscattering of Elastic Waves: Role of Source, Polarization and Near Field, *J. Acous. Soc. Am.* **110(3)**, 1291-1298 (2001).
- 101) L. Margerin, M. Campillo and B.A. van Tiggelen, Coherent Backscattering of Acoustic Waves in the Near Field, *Geophysical Journal International* **145(3)**, 593-603 (2001).
- 102) L. Margerin, B.A. van Tiggelen, and M. Campillo, Effect of Absorption on Energy Equipartition of Elastic Waves in the Seismic Coda, *Bulletin of the Seismological Society of America* **91(3)**, 624-627 (2001).
- 103) N.P. Trégoures and B.A. van Tiggelen, Quasi-Two Dimensional Transfer of Elastic Waves, *Phys. Rev. E* **66**, 036601 (2002).
- 104) N.P. Trégoures and B.A. van Tiggelen, Generalized Diffusion Equation for Elastic Waves, *Waves in Random Media* **12**, 21 (2002).
- 105) F.A. Pinheiro and B.A. van Tiggelen, Magneto-Chiral Scattering of Light: Optical Manifestation of Chirality, *Phys. Rev. E.* **66**, 016607 (2002).
- 106) F.A. Pinheiro and B.A. van Tiggelen, Light Transport in Chiral and Magneto-chiral Random Media, *J. Opt. Soc. Am. A* **20**, 99-105 (2003).
- 107) G.L.J.A. Rikken and B.A. van Tiggelen, Reply to Comment on « The Direction of Optical Energy Flow in a Transverse Magnetic », *Phys. Rev. Lett.* **90**, LRK811 (2003).
- 108) F.A. Pinheiro, M. Rusek, A. Orłowski, and B.A. van Tiggelen, Probing Anderson Localisation of Light via Decay Rate Statistics, *Phys. Rev. E* **69**, 026605 (2004).
- 109) B.A. van Tiggelen, Green function Retrieval and Time-reversal in a Disordered World, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 243904 (2003).
- 110) A. Chabanov, N.P. Trégoures, B.A. van Tiggelen, and A.Z. Genack, Mesoscopic Fluctuations in the Polarization of Electromagnetic Waves, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 173901 (2004).
- 111) A.E. Malcolm, J. Scales, and B.A. van Tiggelen, Extracting the Green function from diffuse, equipartitioned waves, *Phys. Rev. E (Rapid Communication)* **70**, 015601(2004).
- 112) J. de Rosny, A. Tourin, A. Derode, B.A. van Tiggelen and M. Fink, Relation between Time-Reversal Focussing and Coherent Backscattering in Multiple Scattering Media : a Diagrammatic Approach, *Phys. Rev. E.* **70**, 046601 (2004) .
- 113) F.A. Pinheiro, M. Rusek, A. Orłowski, and B.A. van Tiggelen, Light Propagation in a Magnetic Field : Random Green Matrix Approach, *Acta Physica Polonica* **105**, 339 (2004).
- 114) E. Larose, L. Margerin, B.A. van Tiggelen and M. Campillo, Weak Localization of Seismic Waves, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 048501 (2004) (cover article).
- 115) B.A. van Tiggelen and G.L.J.A. Rikken, Comment on : Quantum Vacuum Contribution to the Momentum of Dielectric Media » (*PRL* 92, 020404 , 2004), *Phys. Rev. Lett.* **93**, 268903 (2004).
- 116) F. van der Biest, A. Sukhovich, A. Tourin, J.H. Page, B.A. van Tiggelen, Z. Liu, and M. Fink, Resonant Tunneling of Acoustic Waves through a Double Barrier consisting of two Phononic Crystals, *Europhys. Lett.* **71**, 63 (2005).
- 117) G.L.J.A. Rikken, B.A. van Tiggelen, V. Krstic, and G. Wagnière, Light Induced Dynamic Magneto-chiral Anisotropy, *Chem. Phys. Lett.* **403**, 298 (2005).
- 118) B.A. van Tiggelen, G.L.J.A. Rikken, and V. Krstic, Field Theory of the Feigel process for the Quantum Vacuum and Classical Sources, soumis à *Phys. Rev. A*.

- 119) Larose, E., A. Derode, M. Campillo, M. Fink 2004 Imaging from one-bit correlations of wideband diffuse wave fields J. Appl. Phys., Vol. **95**, No. 12, 8393-8399.
- 120) N.M. Shapiro and M. Campillo (2004) Emergence of broadband Rayleigh waves from correlations of the ambient seismic noise, Geophys. Res. Letters, VOL. **31**, L07614, doi:10.1029/2004GL019491, 2004
- 121) Shapiro, NM, M. Campillo, L. Stehly and Mike Ritzwoller 2005 High Resolution Surface Wave Tomography from Ambient Seismic Noise, Science **307**, 1615-1618.
- 122) Paul, A., M. Campillo, L. Margerin, E. Larose and A. Derode (2005) Empirical synthesis of time-asymmetrical Green function from the correlation of coda waves Journal of Geophysical Research, **110**, doi:10.1039/2004JB003521.
- 123) Larose, E., A. Khan, Y. Nakamura, and M. Campillo (2005) Lunar subsurface investigated from correlation of seismic noise, Geophys. Res. Let. doi: 10.1029/2005GL023518 (2005).
- 124) Larose, E., A. Derode, D. Cloennec, L. Margerin, and M. Campillo (2005) Passive Retrieval of Rayleigh Wave in Disordered Elastic Media Phys. Rev. E in press.
- 125) D. Lacoste, V. Rossetto, F. Jaillon et H. Saint-Jalmes, Geometric depolarization in patterns formed by backscattered light, Optics Letters **29**, 2040-2042 (2004).

II.2.2 Articles dans des revues sans comité de lecture (SCL)

- 1) F. Faure and B. Zhilinskii, Qualitative features of intra-molecular dynamics. What can be learned from symmetry and topology, Acta Appl. Math. **70**, 265-282, (2002).

II.2.3 Conférences invitées (INV)

- 1) C. Colinet et A. Pasturel, *Phase diagram calculations : contribution of ab initio and cluster variation methods*, TMS congrès : Hume-Rothery Award Symposium, Seattle (Fevrier 2002).
- 2) C. Colinet et A. Pasturel, *Ab initio study of one-dimensional long-period structures*, TMS congrès : Computational phase transformations, Seattle (Fevrier 2002).
- 3) A. Pasturel, *Analyse des contraintes et des propriétés mécaniques de films minces : Une approche ab initio*, Ecole « Spectroscopie Raman en Chimie et en Physique des Matériaux », Les Houches (Mars 2002).
- 4) A. Pasturel, *First-principles Quantum Mechanical predictions of alloy ground states*, IAC-3 (3ème Int. Alloy Conf.) Estoril (Juillet 2002).
- 5) P.E.A Turchi et A. Pasturel, *A review of first-principles approaches to Alloy Thermodynamics*, Calphad, Stockholm (Mai 2002).
- 6) M. Sluiter et A. Pasturel, *Study of the mu phas : First-principles and Calphad approach*, Calphad, Stockholm (Mai 2002).
- 7) M. Sluiter, A. Pasturel et Y. Kawazoe, *Phase Stability in Complex Phases: How Ab initio calculations are beginning to complement: CALPHAD phase diagram assessments*, Workshop on Computational Thermodynamics Tokyo (Mai 2002).
- 8) A. Pasturel, *Simulations ab initio et Modélisation Multi-échelles*, Workshop « Simulations Moléculaires en synthèse ou traitement des matériaux par voie gazeuse » Orléans (Juillet 2002).
- 9) A. Pasturel, *Applications of first-principles calculations to the design of rechargeable Li-batteries*, ESCM 2002: Electronic Structure and Computational Magnetism Washington (Juillet 2002).
- 10) A. Pasturel, *Modélisation Multi-échelles en Sciences des Matériaux*, Galerne 2002 Clermont-Ferrant (Septembre 2002).
- 11) C. Colinet et A. Pasturel, *Ab initio Calculations Of formation energies in metallic alloys*, Thermodynamics of Alloys (TOFA 2002) Rome (Septembre 2002).
- 12) Pasturel, *Recent Progress in Computational Materials Science*, Workshop “ New Challenges in Computational Chemistry” Londres (Avril 2003)
- 13) N. Jakse et A. Pasturel, *Local order in metallic supercooled liquids*, Condensed Matter and Materials Physics Conf. Belfast (Avril 2003).
- 14) M. Sluiter, A. Pasturel et Y. Kawazoe, *Site occupations in Complex Intermetallics*, Calphad, Montreal (Juin 2003).
- 15) M. Sluiter et A. Pasturel, *Phase Diagram Prediction of Au-Pd and Ag-Pt alloys*, Japan Society for the Promotion Of Science Tokyo (Octobre 2003).
- 16) C. Colinet et A. Pasturel, *Chemical Short range order effects on Stability in d Pu-Ga alloys*, MRS Boston (Décembre 2003) .
- 17) N. Jakse et A. Pasturel, *Prediction of SRO of Liquid and Supercooled Metals by ab initio Molecular Dynamics*, XIIème Int. Workshop on Comput. Physics and Materials Science Gif sur Yvette (Janvier 2004).
- 18) A. Pasturel, *Local Order in metallic Supercooled Systems*, Dynamics of Disordered materials on the nanometer scale, Hanoi Vietnam (Fevrier 2004).
- 19) A. Pasturel et M. Sluiter, *Phase Stability in Complex Metallic Systems*, The Didier de Fontaine Symposium on the Thermodynamics of Alloys, TMS Charlotte (Mars 2004).

- 20) D.L. Price, N. Jakse, M.L. Saboungi et A. Pasturel, *Structure and Dynamics of levitated Liquid Boron and Silicon*, LAM 12, Metz Juillet 2004
- 21) N. Jakse, O. Le Bacq et A. Pasturel, *Structural Ordering in Liquid AlMn alloys*, POLIMAT ESRF-CECAM Workshop , Grenoble (Juillet 2004)
- 22) C. Colinet et A. Pasturel, *Ab initio calculations of Enthalpies of Formation of Intermetallic Compounds* TOFA 2004, Vienne (Septembre 2004).
- 23) A. Pasturel, *Ingénierie Quantique*, Séminaire IPMC , Grenoble (Janvier 2005).
- 24) P. Peyla et A. Pasturel, *Mechanical Properties of a graphite oxide Surface : from micro to macro scales*, Symposium on Surface Science 2005 Les Arcs (Mars 2005)
- 25) Pasturel et M. Sluiter, *Phase Stability in Complex Structures*, Fourth International Alloy Conference IAC-4, KOS (Juin2005).
- 26) F. Hekking, *Entanglement and quantum measurements in Josephson junction circuits*, Workshop on Superconductors and Hybrid Structures at Extreme Scales and conditions, Lorentz Centre, April 2002, Leiden, Netherlands.
- 27) F. Hekking, *Cooper pair box coupled to a current-biased Josephson junction*, EuroWorkshop on Quantum computers: Mesoscopic implementation; perspectives and open problems, June 2002, Turin, Italy.
- 28) F. Hekking, *Influence of a quantum measurement on coherent charge transfer in an adiabatic Cooper pair pump*, III International Workshop on Macroscopic Quantum Coherence and Computing (MQC2), June 2002, Naples, Italy.
- 29) F. Hekking, *Entanglement and quantum measurements in Josephson junction circuits*, New Directions in Mesoscopics (towards Nanoscience), NATO-ASI, July-August 2002, Ettore Majorana Centre, Erice, Italy.
- 30) F. Hekking, *Thermal transport in a disordered quantum wire*, Minicolloque 09 "Transport et interactions dans les fils quantiques", 8èmes Journées de la matière condensée, August 2002, Marseille, France.
- 31) F. Hekking, *Mesoscopic superconductivity*, series of lectures at national colloquium "Mesoscopic quantum physics", September 2002, La Londe les Maures, France.
- 32) F. Hekking, *Thermal transport in a disordered quantum wire*, Progress in condensed matter theory, October 28 – November 1, 2002, Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, Germany.
- 33) F. Hekking, *Measurement of coherent charge transfer in an adiabatic Cooper pair pump*, International Conference on Nanoelectronics, 4 - 9 January 2003, Lancaster University, Lancaster, UK.
- 34) F. Hekking, *Quantum transport in low-dimensional conductors*, series of lectures at Ecole thématique Nanotubes, Science and Applications, 21 March - 3 May, 2003, Aussois, France.
- 35) F. Hekking, *Coherent charge transfer in an adiabatic Cooper pair pump*, NATO Advanced Research Workshop on Theory of Quantum Transport in Metallic and Hybrid Nanostructures, August 2003, St. Petersburg, Russia.
- 36) F. Hekking, *Coherent charge transfer in an adiabatic Cooper pair pump*, International Theory Workshop on Nanoscale Superconductivity and Magnetism III, September -- November 2003, Argonne National Laboratory, USA.
- 37) F. Hekking, *Influence of thermal fluctuations on an underdamped Josephson tunnel junction*, International Symposium on Mesoscopic Superconductivity and Spintronics (MS+S2004), March 1 - 4, 2004, NTT Basic Research Laboratories, Atsugi-shi, Japan.
- 38) F. Hekking, *Thermal transport in granular metals*, Advanced Research Workshop Fundamentals of electronic nanosystems, June 28 -- July 2, 2004, St. Petersburg, Russia.
- 39) F. Hekking, *Electronic transport in hybrid systems: normal/superconducting/ferromagnetic*, series of lectures at Les Houches Summer School Session 81 Nanoscopic Quantum Physics, June 28 - July 30, 2004, Les Houches, France.
- 40) F. Hekking, *Influence of thermal fluctuations on an underdamped Josephson tunnel junction*, International Argonne Fall Workshop on Nanophysics, October - November, 2004, Argonne National Laboratory, USA.
- 41) F. Hekking, *Correlated tunnelling in hybrid superconductor-ferromagnetic structures*, SFINX-meeting, January 5 - 7, 2005, Lyon, France.
- 42) F. Hekking, *High-frequency quantum noise of a mesoscopic conductor*, Advanced research workshop Nanopeter 2005 *Fundamentals of electronic nanosystems*, June 25 – July 1, 2005, St. Petersburg, Russia.
- 43) F. Hekking, *Quantum dynamics and phase diagram of underdamped Josephson junctions*, ESF Research Conference on Fundamental Problems of Mesoscopic Systems: *Entanglement and coherence in nanoelectronics*, 3-8 September 2005, Acquafredda di Maratea, Italy.
- 44) F. Pistolesi, *Andreev reflection with pseudo-gap*, 10-21 Juin, 2002, Villa Gualino, Torino, Italie. *Euroconference Quantum Computers: Mesoscopic implementation; perspectives and open problems.*
- 45) F. Pistolesi, *Energy dependence of current noise in a NS diffusive structure*, 24-29 Août 2003, St. Petersburg (Russie), NATO-ARW. *Theory of Quantum Transport in Metallic and Hybrid Nanostructures.*
- 46) F. Pistolesi, *Cross-current correlations in a SN hybrid structure*, 19 Octobre-9 Novembre 2003, *Workshop on Magnetism and superconductivity*, Argonne National Laboratory.

- 47) F. Pistolesi, *Energy dependence of current noise in a NS diffusive structure*, 12-14 Novembre 2003, Grenoble, atelier du IPMC de Grenoble. *Fortes corrélations transport électronique, mésoscopique et moléculaire*.
- 48) F. Pistolesi, *Full counting statistics of a charge shuttle*, 4-8 Juin 2004, Workshop sur *Fundamental Problems in Nanomechanical Systems* (Gothenburg, Sweden).
- 49) F. Pistolesi, *Full counting statistics of a charge shuttle*, 28 Juin-2 Juillet 2004, Advanced research workshop : *Fundamentals of electronic nanosystems*.
- 50) F. Pistolesi, *Introduction to the phenomenology of superconductors* (3 heures), 24 Août-2 Septembre 2004, cours pour la 5th SCENET School of Superconductivity, Salamanca (Spain).
- 51) F. Pistolesi, *The charge shuttle as a nanomechanical ratchet*, 24 Octobre-19 Novembre 2004, *Workshop on Magnetism and superconductivity*, Argonne National Laboratory.
- 52) F. Pistolesi, *Superharmonic Josephson relation at 0- π -junction transition*, 3-6 Juillet 2005, ESF PESC Exploratory Workshop sur New phenomena in superfluidity and superconductivity.
- 53) F. Pistolesi, *Introduction to the phenomenology of superconductors* (3 heures), 18-30 Juillet 2005, cours pour la 6ème SCENET School of Superconductivity, Harjattulan Kartano Oy, Turku, (Finland).
- 54) F. Pistolesi, *Superharmonic Josephson relation at 0- π -junction transition*, 14-19 Novembre 2005, Workshop on Magnetism and superconductivity, Argonne National Laboratory.
- 55) F. Pistolesi, *Bose condensation in trapped gases*, 26 Mars 2002, ENS de Lyon.
- 56) F. Pistolesi, 5 Juillet 2002, ESPCI de Paris, Andreev reflection with pseudogap.
- 57) F. Pistolesi, 16 Décembre 2002, Université de Camerino, Superconductivity with hard-core repulsion: BCS-Bose crossover and s-/d-wave competition.
- 58) F. Pistolesi, *Bruit de grenaille dans des structures hybrides supraconducteur métal-normal*, 12 Juillet 2003, séminaire au LPS Orsay.
- 59) F. Pistolesi, *Energy dependence of current noise in a NS diffusive structure*, Octobre 2003, Northwestern University.
- 60) F. Pistolesi, *Nano-électro-mécanique : fluctuation de courant dans les navettes de charge*, 24 Mai 2004, Séminaire du laboratoire Pierre Aigrain, Ecole Normale Supérieure.
- 61) F. Pistolesi, *Dépendance en énergie du bruit dans les systèmes*, 8. Mai 2005, Séminaire à l'Ecole Normale Supérieure de Pise.
- 62) P. Simon, *Kondo screening cloud effects in mesoscopic devices*, Euroconference "Spin and Charge Transport in Nanostructures", Septembre 2003, Braga (Portugal).
- 63) P. Simon, *Kondo screening cloud effects in mesoscopic devices*, GDR Physique Quantique Mésoscopique, Septembre 2003, Aussois (France).
- 64) P. Simon, *Exotic Kondo effect from magnetic trimers*, International Argonne Fall Workshop on Nanophysics IV, Novembre 2004, Argonne (USA).
- 65) P. Simon, *Spintronics with orbital Kondo effect*, International Workshop Ultra 1D: Coherence and decoherence at the nanoscale, Août 2005, Corfou (Grèce).
- 66) P. Simon, *Exotic physics in Chromium trimers adsorbed on Gold surface*, International Workshop "Spintronics05", Septembre 2005, Poznan, Wielkopolska, Poland.
- 67) P. Simon, *Spintronics with orbital Kondo effect*, International Argonne Fall Workshop on Nanophysics V, December 2005, Argonne (USA).
- 68) P. Simon, *Smearing of charge fluctuations by spin fluctuations*, Avril 2003, Department of Physics, Mc Master university (Hamilton, Canada).
- 69) P. Simon, *Smearing of charge fluctuations by spin fluctuations*, Avril 2003, Department of Physics, Mc Gill university (Montreal, Canada).
- 70) P. Simon, *Kondo effect in nanostructures*, Mai 2003, Department of Physics, Sherbrooke university (Sherbrooke, Canada).
- 71) P. Simon, *Smearing of charge fluctuations by spin fluctuations*, Mai 2003, Department of Physics, Cornell university (Ithaca, USA).
- 72) P. Simon, *Smearing of charge fluctuations by spin fluctuations*, Mai 2003, Department of Physics, Boston university (Boston, USA).
- 73) P. Simon, Effet Kondo dans les nanostructures, Mai 2003, LEPES, CNRS (Grenoble).
- 74) P. Simon, *Spin and orbital Kondo effects in double dot structures*, Octobre 2003, Department of Physics, Institute of Physics, University of Technology and Economics, (Budapest, Hongrie).
- 75) P. Simon, *Spin and orbital Kondo effects in double dot structures*, Janvier 2004, Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris Sud (Orsay, France).
- 76) P. Simon, *Spin and orbital Kondo effects in double dot structures*, Avril 2004, Department of Physics and Astronomy, University of Basel (Bâle, Suisse).
- 77) P. Simon, *Spin and orbital Kondo effects in double dot structures*, Mai 2004, theorie de la matiere condensee, university of Karlsruhe (Allemagne).
- 78) P. Simon, *Spin and orbital Kondo effects in double dot structures*, Août 2004, Paul Scherrer Institut (Villigen, Suisse).

- 79) P. Simon, *Exotic Kondo effect from magnetic trimers*, Janvier 2005, Service de Physique Théorique, Saclay.
- 80) P. Simon, *Exotic Kondo effect from magnetic trimers*, Avril 2005, Department of Physics and Astronomy, University of Basel (Bâle, Suisse).
- 81) P. Simon, *Exotic Kondo effect from magnetic trimers*, Juin 2005, Department of Physics and Astronomy, University of British Columbia (Vancouver, Canada).
- 82) P. Simon, *Spintronics with orbital Kondo effect*, Décembre 2005, Ecole Normale Supérieure de Lyon.
- 83) S.E. Skipetrov, Dynamique de la localisation d'Anderson, Université de Konstanz, Groupe « Physique de la Matière Molle » dirigée par Prof. G. Maret (Konstanz, Allemagne, 25 Novembre 2003)
- 84) S.E. Skipetrov, Optique linéaire et non linéaire des milieux désordonnés, Séminaire de radio-physique théorique, Département de Radio-physique Quantique, Institut Lebedev de Physique, Académie de Sciences de Russie (Moscou, Russie, 18 Mai 2005)
- 85) S.E. Skipetrov, Ondes diffuses en milieux désordonnés, Département de Physique, Université Lomonossov de Moscou (Moscou, Russie, 24 Mai 2005)
- 86) S.E. Skipetrov, Instabilities and chaos in nonlinear optics of disordered media, NATO Advanced Study Institute « Wave Scattering in Complex Media: From Theory to Applications » (Cargèse, France, Juin 10-22, 2002).
- 87) S.E. Skipetrov, Instability of optical speckle patterns in cold atomic gases ? Workshop « Saturation effects in multiple scattering of light by cold atomic gases » (Institut Non Linéaire de Nice, Sophia Antipolis, France, 8-10 October 2003).
- 88) S.E. Skipetrov, Les corrélations des ondes diffuses en milieu désordonné et leur rôle dans les télécommunications, Journée interdisciplinaire « Télécommunications en milieu désordonné » (Institut Henri Poincaré, Paris, France, Juin 20, 2003).
- 89) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, Signatures of Anderson localization in pulse transmission through disordered media, 13th International Laser Physics Workshop (LPHYS'04) (ICTP, Trieste, Italy, 12-16 July 2004).
- 90) S.E. Skipetrov, Dynamics of light in strongly scattering random media: breakdown of diffusion, Anderson localization and random lasers, International Conference on Coherent and Nonlinear Optics (ICONO 2005) (St. Petersburg, Russia, 11-15 May 2005).
- 91) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, Self-consistent theory of Anderson localization, Workshop of the French-German Research-Training College (Konstanz, Germany, 4-8 September 2005).
- 92) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, Transport theory for localized waves, 2nd Workshop on Quantum Chaos and Localisation Phenomena (Warsaw, Poland, 19-22 May 2005).
- 93) S.E. Skipetrov, Interference effects in disordered media are amplified with time (poster), International Meeting on « Mesoscopic Physics with Matter and Waves » (Laboratoire de Physique des Solides, Orsay, France, 21-22 March 2005).
- 94) S.E. Skipetrov, Multiple scattering of light in nonlinear disordered media, 13th International Laser Physics Workshop (LPHYS'04) (ICTP, Trieste, Italy, 12-16 July 2004).
- 95) S.E. Skipetrov, Wireless communications in disordered media with diffuse waves (internet report), Saratov Fall Meeting: International School for Young Scientists and Students on Optics, Laser Physics and Biophysics (Saratov, Russia, 7-10 October 2003).
- 96) S.E. Skipetrov, Instabilité de speckle en milieux désordonnés et non linéaires, Colloque « Propagation dans des Milieux Hétérogènes: Diffusion et Conditions aux Limites » (ESPCI, Paris, France, Mai 10, 2001).
- 97) S.E. Skipetrov, Nonlinearity-induced temporal instability of multiple-scattering speckle patterns (poster), Workshop « Coherent Evolution in Noisy Environments » (Dresden, Germany, May 21-25, 2001).
- 98) R. Maynard, Diffusive waves in nonlinear disordered media, Ecole OTAN/CNRS Cargèse, juin 2002, séminaire invité.
- 99) R. Maynard, Waves in random media, Constance septembre 2004, , séminaire invité
- 100) R. Maynard, Penser le désordre en physique, L'héritage d'Einstein : du mouvement brownien au cri primal de l'univers, l'aventure continue, Beyrouth 2005
- 101) R. Maynard, Penser le désordre en physique, L'héritage d'Einstein : du mouvement brownien au cri primal de l'univers, l'aventure continue, Rennes 2005
- 102) R. Maynard, Penser le désordre en physique, L'héritage d'Einstein : du mouvement brownien au cri primal de l'univers, l'aventure continue, Grenoble 2005.
- 103) R. Maynard, Les nanosciences, ou la rencontre des sciences fondamentales et des technologies, Grenoble 2005.
- 104) R. Maynard, Les nanosciences, ou la rencontre des sciences fondamentales et des technologies, Rouen 2005.
- 105) R. Maynard, Les nanosciences, ou la rencontre des sciences fondamentales et des technologies, Limoges 2005.
- 106) R. Maynard, Les nanosciences, ou la rencontre des sciences fondamentales et des technologies, Oujda 2005.

- 107) R. Maynard, Physique et Information, Paris 2005
- 108) Bart van Tiggelen, Université de Marne la Vallée, Paris, janvier 19, 2001, Waves in Complex Media: Interdisciplinary Physics?
- 109) Bart van Tiggelen, Max-Planck Institut fuer Physik Komplexer Systeme, Dresden (Allemagne), Workshop on Coherent Evolution in Noisy Environments, Waves in Complex Media, from Light towards Seismic Waves , Mai 21-25, 2001.
- 110) Bart van Tiggelen, University of Delft (Pays-Bas), Ultrasonics International 2001, Multiple Scattering and Equipartition of Seismic waves, 2-5 Juillet 2001.
- 111) Bart van Tiggelen, University of Delft (Pays-Bas), séminaire invité, Waves in Complex Media : from nano towards kilo... , 24 octobre 2001.
- 112) Bart van Tiggelen, Mésoscopie et Décohérence des Photons: Cours Les Houches Ecole Prédoctorale Physique Mésoscopique (directed by F. Hekking, B. Pannetier et C. Delalande) 2-14 september 2001:
- 113) Bart van Tiggelen, Les Houches, New Trends in the Theory of Physic in High Magnetic Fields, NATO Advanced Research Workshop, Magneto-Optics with Diffuse Light, 25 février 2002, séminaire invité.
- 114) Bart van Tiggelen, Grenoble, Laboratoire d'Écoulement (LEGI), Ondes en Milieu Complexe, 4 avril 2002, séminaire invité.
- 115) Bart van Tiggelen, Cargèse, Institut des Etudes Scientifiques, 10 juin 2002, Introduction à l'Ecole OTAN/CNRS Interdisciplinaire "Wave Scattering in Complex Media".
- 116) Bart van Tiggelen, Orlando USA, Meeting of the Optical Society of America, Optics of Magneto and Chiral Media, 3 septembre 2002, séminaire invité.
- 117) Bart van Tiggelen, Queens College New York City, Optics of Magneto and Chiral Media, 7 septembre 2002 , séminaire invité.
- 118) Bart van Tiggelen, Yeshiva University New York City, Mesoscopic Physics with Classical Waves : from nano towards kilo..., 9 septembre 2002, séminaire invité.
- 119) Bart van Tiggelen, Dautreppe 2002, Grenoble, Developpements recents en optique, applications scientifiques et industrielles, optique en milieu complexe, 25 septembre 2002, séminaire invité.
- 120) Bart van Tiggelen, Varsovie (Académie des Sciences de Pologne), Mesoscopic Physics with Classical Waves : from nano towards kilo..., 5 novembre 2002, séminaire invité.
- 121) Bart van Tiggelen, Cancun (Mexique), Mesoscopic Physics with Seismic Waves, 4 décembre 2002, First PAN-American Meeting on Acoustics, séminaire invite.
- 122) Bart van Tiggelen, Irvine (University of California), USA, Mesoscopic Physics with Classical Waves : from nano towards kilo..., 6 décembre 2002, séminaire invité.
- 123) Bart van Tiggelen, Golden (Colorado School of Mines), USA, Mesoscopic Physics with Classical Waves : from nano towards kilo..., 9 décembre 2002, séminaire invité.
- 124) Bart van Tiggelen, Groupe Physique de la Solide, Jussieu, Paris Ondes en Milieu Complexe, from nano towards kilo..., 16 janvier 2003, séminaire invité.
- 125) Bart van Tiggelen, Varsovie (Colloque CE Localization and Mesoscopic Physics), Coherent Backscattering and Universal Conductance Fluctuations around the photon mobility edge, 24 mai 2003, séminaire invité.
- 126) Bart van Tiggelen, Enschede (Université de Twente), Mesoscopies with Seismic Waves, 11 Juin 2003, séminaire invité.
- 127) Bart van Tiggelen, Paris (Institut HP, rencontre GDR IMCODE sur les télécommunications), Introduction aux Activités du GDR IMCODE, 20 juin 2003
- 128) Bart van Tiggelen, Grenoble (Journée Optique Alpes), Mésoscopie des Micro-ondes, 1 juillet 2003, séminaire invite.
- 129) Bart van Tiggelen, Lyon, Congrès général de la SFP 2003, Mésoscopie des Ondes Sismiques, 7 Juillet 2003, séminaire invite (Session Sciences de la Terre) .
- 130) Bart van Tiggelen, Lyon, Ecole Normale Supérieure (JF PINTON), 12 janvier 2004, Mésoscopie des Ondes Classiques, séminaire invité
- 131) Bart van Tiggelen, Marseille, Institut Fresnel (D. MAYSTRE), 14 janvier 2004, Mésoscopie des Ondes Classiques, séminaire invite.
- 132) Bart van Tiggelen, Golden (Colorado School of Mines), USA, Weak Localization of Seismic Waves, 27 janvier 2004, séminaire invite.
- 133) Bart van Tiggelen, Urbana-Champaign, 29 janvier 2004, Department for Theoretical and Applied Mechanics (Richard Weaver), Mesoscopic Physics with Seismic Waves, TAM-physics colloquium.
- 134) Bart van Tiggelen, Winnipeg, University of Manitoba, Canada (John Page), 3 février 2004, Mesoscopic Physics with Seismic Waves, Physics Institute Colloquium.
- 135) Bart van Tiggelen, Toulouse, Laboratoire des Champs Magnétiques Pulsés (Geert Rikken), 19 février 2004, Mésoscopie des Ondes Classiques, séminaire invité.
- 136) Bart van Tiggelen, Pisa, PIERS 2004, Mars 2004, Dynamics and Decay of Localized States, séminaire invité

- 137) Bart van Tiggelen, Florence, Mars 2004, European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy (LENS), Waves in Complex Media, Colloque de physique.
- 138) Bart van Tiggelen, Theory of Green function retrieval and time-reversal in a disordered word (poster), Cargèse, Juillet 2004, Ecole CNRS Imaging with Sound and seismic waves.
- 139) Bart van Tiggelen, Noordwijk, Février 2005, European Space Agency, The Momentum of Quantum Vacuum, kick-off meeting on the Feigel process.
- 140) Bart van Tiggelen, Dresde (Allemagne), Mars 2005, Workshop on Aspects of Quantum Chaotic Scattering, Dynamic correlations, interference and time-dependent speckles in wave diffusion, séminaire invité.
- 141) Bart van Tiggelen, Grenoble, 4 avril 2005, GDR groupe de travail CORRELATION OF SEISMIC WAVES AND THE EMERGENCE OF THE GREEN FUNCTION, Emergence of Green function in diffuse media, séminaire invite.
- 142) Bart van Tiggelen, Prospective 2005, présentation du LPMMC UMR 5493 à l'UFR de Physique, Université de Grenoble, 2 mai 2005.
- 143) Bart van Tiggelen, Mésoscopique, mais pas quantique !, colloque « Hommage à Fritz London », le 11 mai 2005, IHP Paris.
- 144) Bart van Tiggelen, Varsovie (Pologne), 20 mai 2005, Field Correlations and time-reversal in a Disordered World, colloque invite.
- 145) Bart van Tiggelen, Toulouse, le 17 juin 2005, Mésoscopie et ondes en milieu complexe, séminaire invité, SFP midi-Pyrénées.
- 146) Bart van Tiggelen, Marseille, CIRM, le 05 septembre 2005, Fluctuations de la phase aléatoire, Colloque GDR « Mathématiques du transfert radiatif et approximation de diffusion », séminaire invité.
- 147) Bart van Tiggelen, Dijon, Colloque sur les Lasers et l'Optique Quantique, (COLOQ9), La Localisation Forte d'Anderson, toujours une frontière en optique, séminaire plénière invité.
- 148) Bart van Tiggelen, Stanford, USA, le 4 octobre 2005, Department of Mathematics and Geophysics (G. Papanicolaou), Mesoscopic physics with Seismic waves, séminaire invité.

II.2.4 Communications avec actes (ACT)

- 1) G. Bignon, M. Houzet, F. Pistolesi, and F.W.J. Hekking, *Cross current correlations in superconducting/normal metal structures*, proceedings de la conference de "Vth Rencontres de Moriond in Mesoscopic Physics", tenue à La Thuile (Italie) le 25 janvier au 1^{er} Fevrier 2004.
- 2) I.S. Beloborodov, F.W.J. Hekking, and F. Pistolesi, *Influence of thermal fluctuations on an underdamped Josephson tunnel junction*, in "New Directions in Mesoscopic Physics (Towards Nanosciences)", édité par R. Fazio, V. F. Gantmakher and Y. Imry, Kluwer (Academic Publisher Amsterdam, 2003), p. 339.
- 3) M. Houzet and F. Pistolesi, *Energy dependence of noise in normal/superconducting diffusive structure*, proceedings pour la Nato ARW "Theory of Quantum Transport in Metallic and Hybrid Nanostructures", St. Petersburg, 2003, Kluwer Academic Publishers, Amsterdam, (2004).
- 4) G. Bignon, M. Houzet, F. Pistolesi, and F.W.J. Hekking, *Detecting crossed Andreev reflection by cross-current correlations*, in Realizing Controllable Quantum States, edited by H. Takayanagi and J. Nitta (World Scientific, New Jersey, 2005), p. 23.
- 5) F. Pistolesi and M. Houzet, *Large energy dependence of current noise in superconducting/normal metal junction*, in Realizing Controllable Quantum States, edited by H. Takayanagi and J. Nitta (World Scientific, New Jersey, 2005), p. 81.
- 6) A.Z. Genack, A. Chabanov, P. Sebbah and B.A. van Tiggelen, *Mesoscopic Dynamics*, in Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications, edited by S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003), page 125-150.
- 7) F.A. Pinheiro and B.A. van Tiggelen, *Light Propagation in Chiral and Magneto-chiral Media*, in Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications, edited by S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003), page 59-74.
- 8) J.H. Page, M.L. Cowan, D.A. Weitz and B.A. van Tiggelen, *Diffusing Wave Spectroscopy : Field Fluctuation Spectroscopy with Multiply Scattered Ultrasonic Waves*, in Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications, edited by S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003), page 151-174.
- 9) S.E. Skipetrov and R. Maynard, *Diffuse waves in nonlinear disordered media*, in Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications, edited by S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003), p 75-97
- 10) F. Scheffold, F. Cardinaux, S. Romer, P. Schurtenberger, S.E. Skipetrov, and L. Cipelletti, *Optical microrheology of soft complex materials*, in Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications, edited by S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003), p 553-563.

II.2.5 Communication sans actes (COM)

II.2.6 Ouvrages scientifiques (OS)

- 1) F.W.J. Hekking, Electron subgap transport in hybrid systems combining superconductors with normal or ferromagnetic metals, Les Houches Session LXXXI, 2004. Nanophysics: Coherence and Transport, edited by H. Bouchiat, Y. Gefen, S. Guéron, G. Montambaux and J. Dalibard, Course 6 (Elsevier, 2005) p. 383.
- 2) F.W.J. Hekking, *Quantum transport in low-dimensional materials*, chapter in *Understanding Carbon Nanotubes*, edited by Loiseau, A.; Launois, P.; Petit, P.; Roche, S.; Salvetat, J.-P (Springer Lecture Notes in Physics Vol. 677, 2005).
- 3) B.A. van Tiggelen and G.L.J.A. Rikken, Manipulating Light in a Magnetic field, in Optical Properties of Random Nanostructures, edited by V. M. Shalaev (Springer Verlag, Heidelberg, 2002) Topics in Applied Physics.
- 4) B.A. van Tiggelen, F.A. Pinheiro, G.L.J.A. Rikken, and D. Lacoste, Recent Trends in the Theory of Magneto-Optical Scattering of Light in: Recent Trends in Theory of Physical Phenomena in High Magnetic Fields (edited by I.D. Vagner et al), Kluwer Academic (2003), pp 323-331.
- 5) A.Z. Genack, A. Chabanov, P. Sebbah and B.A. van Tiggelen, Waves in Random Media, in : Encyclopedia of Condensed Matter Physics , edited by G. Bassani, G. Liedl and P. Wyder (Elsevier, 2005).
- 6) Campillo, M. (2005) Phase and Correlation in 'Random' Seismic Fields and the Reconstruction of the Green Function (2005) Pure and Applied Geophysics, in press.
- 7) E. Larose, L. Margerin, A. Derode, B.A. van Tiggelen, M. Campillo, N. Shapiro, A. Paul, L. Stehly et M. Tanter, Correlation of Random Wavefields: Theory and Application, Special Issue of Geophysics, in press.

II.2.7 Ouvrages de vulgarisation (OV)

- 1) D. Jérôme, J.M. Raimond, X. Bouju, J.F. Joanny, et B.A. van Tiggelen (commission des publications SFP), Les Français: seraient-ils fâchés avec leurs publications scientifiques, une déclin ou une dérive ? , Bulletin de la SFP, Juin 2004 ; Europe and Scientific Publications: the Exception, Europhys. News 35, 168 (2004).
- 2) L. Margerin, M. Campillo, B.A. van Tiggelen, Diffusion Multiple des Ondes Sismiques, Images de la Physique 2005, pages 220-225. (Journal du département SPM).
- 3) R. Maynard et J.L.Robert, Les nanosciences ou la rencontre des sciences fondamentales et des technologies, numéro spécial, Bulletin SFP-UdPPC, juin 2005.

II.2.8 Directions d'ouvrages (DO)

- 1) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen (editors), Wave Scattering in Complex Media, from theory to applications (NATO series Vol. 107, Kluwer, Dordrecht, 2003).

II.2.9 Autres publications (AP)

- 1) A. Pisch et A. Pasturel, *Enthalpy of formation of the NbFe₂ Laves phase* (prépublication).
- 2) N. Jakse et A. Pasturel, *Molecular Dynamics Study of Liquid and Undercooled Nickel* (prépublication).
- 3) F. Faure, Geometric and topological aspects of slow and fast coupled dynamical systems in quantum and classical dynamics. Lecture notes for lectures given in Saclay S.P.TH., march-avril 2002, and M.A.S.I.E. Spring School, Warwick, March 2002, http://www-spht.cea.fr/cours-ext/fr/lectures_notes.shtml
- 4) F. Faure, Long time semiclassical evolution of wave packets in quantum chaos. Example of non quantum unique ergodicity with hyperbolic maps. Lecture notes for I.H.P. School, June 2005, <http://www.math.jussieu.fr/~baladi/ihp.html>
- 5) A. Bender, F. Hekking, and Y. Gefen, Adiabatic Pumping and Berry's Phase in a Mesoscopic Ring (prépublication).
- 6) R. Ferone and F.W.J. Hekking, Thermal transport in a disordered quantum wire (prépublication).
- 7) M. Governale, F. Taddei, F.W.J. Hekking, and R. Fazio, Adiabatic pumping in a superconductor-normal-superconductor weak link (prépublication).
- 8) F.W.J. Hekking and J.P. Pekola, Finite frequency quantum noise in an interacting mesoscopic conductor (prépublication).
- 9) P. Simon, O. Entin-Wohlmann, A. Aharony, *Flux-dependent Kondo temperature in an Aharonov-Bohm interferometer with an in-line quantum dot*, (prépublication).
- 10) D. Feinberg, P. Simon, *An electronic Stern-Gerlach interferometer*, (prépublication).
- 11) P. Simon, J. Salomez, D. Feinberg, *Spectroscopy of finite size Kondo effects in multi-terminal geometries*, (prépublication).
- 12) P. Simon et D. Feinberg, Decoherence and Kondo effects, (prépublication).
- 13) G. Bignon, F. Pistolesi and M. Houzet, Energy dependence of current noise in double barrier hybrid structure, (prépublication).
- 14) M. Houzet, V. Vinokur, F. Pistolesi, Superharmonic Josephson relation at 0- π -junction, (prépublication).
- 15) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, *Dynamics of Anderson localization in open 3D media* (prépublication, cond-mat/0508726).

- 16) B.A. van Tiggelen and S.E. Skipetrov, *Fluctuations in local density of states and C0-speckle are equal*, (prépublication, cond-mat/0508641).
- 17) E. Larose, J. Derosny, P. Goudeard, L. Margerin, D. Anache, M. Campillo et B.A. van Tiggelen, *Observation of Coherent Backscattering and Diffuse Wave Spectroscopy in Concrete Structure* (prépublication).
- 18) S.E. Skipetrov and B.A. van Tiggelen, *Weak localization of short pulses in disordered waveguides* (prépublication, cond-mat/0508104).

II.2.10 Autres activités internationales (AI)

- 1) F. Hekking, Th. Martin, et F. Pistolesi, comité d'organisation de la rencontre internationale *Bruit et statistique complète de comptage*, Marseille, Septembre 2002.
- 2) G. Falci, F. Hekking, and S. Pellegrini, comité d'organisation de l'atelier *Entanglement at the Nanoscale*, 28 octobre – 8 novembre 2002, International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italy.
- 3) F. Hekking, Th. Martin, and G. Montambaux, comité d'organisation de l'atelier *Full Counting Statistics and Noise*, 20 – 21 novembre 2003, Centre de Physique Théorique, Marseille (France).
- 4) F. Hekking, membre du comité d'organisation de l'école internationale d'été ESONN, *European School on Nanosciences-Nanotechnologies*, Grenoble (France) sessions 2004 - 2006.
- 5) B.A. van Tiggelen et S.E. Skipetrov, Directeurs du projet NATO ASI Wave Scattering in Complex Media: Foundations and Applications, Juin 2002, Cargèse.
- 6) B.A. van Tiggelen, février 2003, colloque en honneur de Roger Maynard, organisateur (avec Eric Akkermans - Haïfa).
- 7) B.A. van Tiggelen, 2004,- Membre du « Editorial board » du journal *Waves in Random Media*.
- 8) B.A. van Tiggelen Orsay, Mars 2005, GDR Meeting on Mesoscopic Physics with Photons and Electrons, organisateur (avec le GDR Mésoscopie quantique : Gilles MONTAMBAUX).
- 9) B.A. van Tiggelen, 2005, - président du Comité Scientifique du Laboratoire Souterrain à Bas Bruit de Rustrel-Pays d'Apt (Université de Nice-Sophia Antipolis).

II.2.11 Information et culture scientifique et technique

II.2.12 Valorisation

En 2004, les crédits associés aux contrats 4) et 16) mentionnés ci-dessous ont été versés par erreur par la comptabilité UJF sur la ligné de fonctionnement du LPMMC. Ces crédits sont indisponibles pour le projet, parce qu'ils ont été considérés comme reliquats 2004.

- 1) F. Faure, Réseau européen MASIE (Mechanics and Symmetry in Europe)
- 2) F. Faure, ACI 2003 « Analyse semi-classique avec application moléculaires »
- 3) F. Faure, F. Hekking et F. Pistolesi, *Effets quantiques dans les supraconducteurs nanostructurés*, ATIP-Jeune chercheurs 2002 (50K€).
- 4) F. Hekking, *Cohérence quantique dans les solides sur l'échelle nanométrique*, projet de collaboration avec Scuola Normale Superiore à Pise (Italie), programme VINCI 2002 de l'université franco-italienne (6k€).
- 5) F. Hekking, *Dynamique quantique des circuits supraconducteurs à base de nanojonctions Josephson*, projet de collaboration avec CNRS-CRTBT, et CNRS-LCMI, ACI-Nanosciences 2003 (50 k€).
- 6) F. Hekking, participation dans SFINx - *Ferromagnet/superconductor hybrids*, projet STREP NMP2-CT-2003-505587.
- 7) F. Hekking, participation dans EuroSQIP, Projet Intégré IST-3-015708-IP.
- 8) F. Pistolesi, *Effet Fabry-Perot dans un puits quantique supraconducteur-semiconducteur*, financé par l'Institut de Physique de la Matière Condensée (Fédération Mixte de Recherche UJF/CNRS/CEA FR072) en 2004, (40k€).
- 9) P. Simon, *Effet Kondo dans les nanostructures*, financé par l'Institut de Physique de la Matière Condensée (Fédération Mixte de Recherche UJF/CNRS/CEA FR072) en 2003 (59 k€).
- 10) B.A. van Tiggelen, 2003-2005 Coordinateur du projet CNRS/NSF « Mesoscopic Physics with Seismic Waves » (avec Prof. R. Weaver – Urbana-Champaign).
- 11) B.A. van Tiggelen et S.E. Skipetrov, 2004, subvention colloque, Armée Américaine.
- 12) B.A. van Tiggelen, 2005, Contrat/Consultance (Agence Spatiale Européenne ESA) « Lorentz –invariant description of the Feigel Process », avec Geert Rikken (Toulouse).
- 13) B.A. van Tiggelen, 2001-2004, Coordinateur du projet Polonium Localisation des Ondes Classiques sous Champ Magnétique (du Ministère des Affaires Etrangères) avec Prof. A. Orłowski (Varsovie).
- 14) B.A. van Tiggelen, 2003, subvention exceptionnelle colloque (en honneur de R. Maynard), Service de Recherche, Université Joseph Fourier.
- 15) B.A. van Tiggelen, S.E. Skipetrov, 2002, Subvention Ecole Thématique CNRS

- 16) B.A. van Tiggelen, 2001- 2004. Coordinateur du ACI Propagation et Mésoscopie des Ondes Sismiques, (du Ministère de la Recherche).
- 17) S.E. Skipetrov (avec Olivier BOURGEOIS) Projet « Etudes thermiques de phénomènes de cohérence de phase » financé par l'Institut de Physique de la Matière Condensée (Fédération Mixte de Recherche UJF/CNRS/CEA FR072) (3 k€).

II.3 – Déclaration de politique scientifique pour la période 2007-2010

II.3 - Déclaration de politique scientifique pour la période 2007-2010

Avant-propos

La présente déclaration de politique scientifique du LPMMC pour la période 2007-2010 ne peut à l'heure actuelle (novembre 2005) avoir la forme achevée souhaitée. La raison principale est la participation de notre unité en tant que partenaire privilégié dans le projet de refondation des laboratoires du campus CNRS sur le polygone Louis Néel. Ce projet, lancé septembre 2005, implique la fusion de quatre unités propres du CNRS en une seule unité.

La liaison entre les unités propres concernées et le LPMMC est une réalité très vivante. Il s'agit d'une liaison entre théoriciens, mais aussi d'une liaison entre théoriciens et expérimentateurs. La politique scientifique du LPMMC est donc très concernée par le projet de refondation. Tout d'abord, il est prévu qu'une partie de nos chercheurs et enseignant-chercheurs appartiennent, en tant que chercheur associé, à certaines des nouvelles équipes de recherche qui sont en train d'être formées dans le cadre du projet de refondation. Cela veut dire qu'une partie de nos activités scientifiques se dérouleront entre le LPMMC et la nouvelle unité. A l'heure actuelle une mobilité de personnel entre le LPMMC et la structure nouvelle n'est pas exclue. Finalement, dans le cadre de la refondation, le LPMMC effectuera la mission « plateforme d'accueil de théoriciens invités et séminaires longue et moyenne durée ». Cette mission, qui sera développée avec plus de détail ci-dessous, est étroitement liée aux deux projets immobiliers sur le polygone Louis Néel proposés par la concertation UJF-CNRS.

Il va sans dire que le projet de refondation requiert réflexion et concertation sur une échelle de temps de plusieurs mois. Cette réflexion est menée au sein d'un groupe de travail autour de Alain Fontaine qui pilote ce projet. Frank Hekking participe au groupe de travail au titre du LPMMC. Un avant-projet détaillé n'est pas attendu avant septembre 2006. Il en résulte que plusieurs éléments de notre politique scientifique ne peuvent être développés en détail à l'heure actuelle. Il s'agit notamment de la constitution précise de nos équipes de recherche, ainsi que de certains détails des activités et collaborations scientifiques à développer lors du quadriennal 2007-2010.

Les grands axes de recherche au sein du LPMMC

Suite à la mobilité du personnel ces dernières années nos axes de recherche ont évolué. Avant de présenter nos projets détaillés de recherche, nous résumons les évolutions scientifiques les plus importantes.

Suite au départ de O. LeBacq (septembre 2004) et Ph. Peyla (septembre 2005), tous les deux membres de l'équipe « auto-organisation des structures complexes » nous sommes entrés dans une période de réflexion sur l'activité de recherche menée au sein de cette équipe qui est à l'heure actuelle représentée par un seul chercheur, A. Pasturel. Cette réflexion est d'ailleurs menée en concertation avec le projet de refondation mentionné ci-dessus, et dans le cadre duquel l'émergence d'une nouvelle équipe « Théorie et simulation numérique des propriétés électroniques » est envisagée. A. Pasturel participera à cette équipe, dont l'objectif scientifique est d'aborder d'un point de vue théorique les propriétés les plus remarquables des matériaux (conductivité, magnétisme, optique) ainsi que leur stabilité et ceci de l'échelle nanométrique à l'échelle macroscopique. Les activités de cette nouvelle équipe comprennent une part d'étude des systèmes physiques et une part de développements méthodologiques. Pour ces raisons l'activité prévue de l'équipe « auto-organisation des structures complexes » ne figure pas dans la présente déclaration comme un axe principal de recherche pour le quadriennal 2007-2010. Cependant, notre politique scientifique concernant les aspects numériques développées au sein du LPMMC est présentée ci-dessous dans la section II.3-C.

Nous souhaitons poursuivre l'ensemble de nos activités de recherche autour de deux axes, « ondes en milieux complexes » et « théorie des systèmes mésoscopiques ». Le recrutement cet automne de deux chargés de recherche aura un impact certain sur les activités menées au sein de ces deux équipes.

Tout d'abord, le projet de recherche de Anna MINGUZZI qui porte sur la physique mésoscopique avec les atomes froids, se déroulera naturellement à l'interface entre les deux axes « ondes en milieux complexes » et « théorie des systèmes mésoscopiques ». Ainsi sa présence au laboratoire augmentera la cohérence et les interactions entre ces deux axes scientifiques au sein du LPMMC. Anna Minguzzi s'intéresse en particulier aux systèmes quantiques enfermés dans un piège, ce qui donne lieu à des effets mésoscopiques intéressants associés à la dimensionnalité réduite du système, comme par exemple l'apparition de fortes fluctuations. Le projet de recherche de Anna MINGUZZI propose de développer davantage ces études des phénomènes mésoscopiques dans les gaz quantiques, en collaboration avec l'équipe « théorie des systèmes mésoscopiques » avec un projet sur la cohérence et la superfluidité en dimensionnalité réduite, ainsi qu'avec l'équipe « ondes en milieu complexe » avec un projet sur la localisation d'Anderson dans les gaz atomiques.

Vincent ROSSETTO renforce l'équipe « ondes en milieux complexe », en particulier dans le domaine de l'optique. Il se propose d'étudier des motifs de la polarisation après rétrodiffusion multiple en milieu anisotrope. Ces motifs

reflètent la distribution de phase géométrique dite de Berry, pour les rayons lumineux et dépendent des propriétés locales des diffuseurs. A plus long terme ce projet vise à améliorer les techniques d'imagerie médicale par diffusion de la lumière. Vincent ROSSETTO fera appel à des techniques théoriques et numériques (algorithme Monte-Carlo). L'existence au LPMMC d'une bonne infrastructure numérique est donc un atout important pour le bon déroulement de ce projet.

L'activité de l'équipe « Ondes en Milieu Complexe » va être centrée autour des problèmes de propagation des ondes (ondes électromagnétiques, acoustiques, sismiques, mais aussi ondes de matière) en milieux désordonnés. Nous nous focaliserons sur les aspects universels et communs pour différents type d'ondes: fluctuations et corrélations mésoscopiques, localisation d'Anderson, etc. Un accent particulier sera placé sur les problèmes d'actualité expérimentale dans ce domaine: atomes froids dans des potentiels optiques désordonnés, imagerie biomédicale et sismique, « laser aléatoire », optique non linéaire et quantique des milieux désordonnés, télécommunications en présence de désordre. Nous allons aussi poursuivre notre activité dans les domaines de magneto-optique (milieux chiraux) et de la thermodynamique de nanosystèmes (métaux et supraconducteurs).

Quant à la « théorie des systèmes mésoscopiques », l'essentiel des activités recherche reste la description physique des systèmes nanométriques, rendue compliquée par l'apparition des phénomènes particuliers. Nous mentionnons ici l'absence d'auto-moyennage dans le sens thermodynamique, ainsi que les effets de type hors équilibre associés aux taux faibles de relaxation. Une attention particulière doit être portée aux effets quantiques associés au désordre (magnétique et non-magnétique) et aux interactions électron-phonon, électron-photon, et électron-électron. Ces phénomènes seront parfois étudiés dans un contexte précis (spintronique, nano-électromécanique, nanocircuits supraconducteurs), lié à nos collaborations et la participation dans plusieurs réseaux de collaboration nationaux et internationaux.

Le LPMMC au sein du polygone Louis Néel

Refondation de la Matière Condensée

Depuis sa création en 1990, le LPMMC a développé d'excellentes relations scientifiques avec plusieurs équipes, expérimentales et théoriques, du polygone Louis Néel. Par conséquent, nous sommes très concernés par le projet de refondation de la physique de la matière condensée à Grenoble. Ce projet, piloté par Alain FONTAINE, a été lancé septembre 2005 et concerne la fusion de quatre unités de recherche en matière condensée, situées sur le campus CNRS. Il s'agit du Laboratoire de Cristallographie, du Centre de Recherches sur les Très Basses Températures (CRTBT), du Laboratoire d'Etude des Propriétés Electroniques des Solides (LEPES), et du Laboratoire Louis Néel. Le LPMMC dépendant de deux tutelles (CNRS et UJF), n'est pas impliqué dans cette fusion. Cependant, étant donné nos relations importantes avec plusieurs équipes de recherche participant dans la fusion, le LPMMC a été identifié comme « partenaire privilégié » pour le projet de refondation. Ce partenariat est motivé par une cohérence de thématique et de collaboration scientifiques d'une part et par une logique immobilière d'autre part.

Thématique et collaboration scientifiques

Comme le montre encore le présent bilan scientifique, nous avons l'habitude de collaborer et de publier régulièrement avec nos collègues théoriciens et expérimentateurs grenoblois, au CNRS comme à l'UJF et au CEA. Les membres du LPMMC participent dans des projets de collaboration impliquant ces mêmes collègues grenoblois, projets financés localement (IPMC), au niveau national (ACI), voire international (STREP et IP européens). Nous souhaitons poursuivre cette politique scientifique pendant le quadriennal 2007-2010. Le partenariat privilégié avec le futur laboratoire issu du projet de refondation de la physique de la matière condensée nous permettra de poursuivre cette politique dans de bonnes conditions.

L'un des thèmes fédérateurs du projet de refondation concerne les nanosciences qui permettent d'envisager une explosion d'applications nouvelles, notamment dans les technologies de l'information et de la communication. La réduction de la taille des composants à des dimensions sous-microniques aboutit à des phénomènes nouveaux dans des domaines variés comme la supraconductivité, le magnétisme, la mécanique, le transport et le traitement de l'information (électronique ou optique). Il s'agit en particulier de chercher une ouverture vers de nouvelles technologies comme l'électronique moléculaire (nanotubes de carbone), la nano-mécanique, les structures hybrides (jonction métal-matériau ferromagnétique), ou encore l'information quantique (systèmes photoniques, nanocircuits supraconducteurs). On ne peut que constater que dans le développement actuel des nanosciences et des nanotechnologies, il apparaît un déficit important en théorie. Il y a un décalage entre le savoir-faire technologique à court terme (réalisation de toute sorte de dispositif à 1 ou 2 particules) et les développements des concepts fondamentaux à plus long terme (comportement quantique non-réductible au comportement classique). Une partie importante de nos activités de recherche s'inscrit naturellement dans ce cadre et a pour but de réduire le déficit

théorique dans le domaine des nanosciences, en particulier à travers des projets de collaboration étroite avec nos collègues grenoblois.

Rôle du LPMMC en physique théorique de la matière condensée

La création et la consolidation du LPMMC constituent la première tentative à Grenoble de stabiliser un groupe de théoriciens dans une unité pérenne. Notre rôle principal consiste d'une part à analyser des mesures expérimentales, d'autre part à prédire des comportements nouveaux ainsi qu'à encourager les transferts conceptuels dans les champs disciplinaires connexes. L'expérience montre que des laboratoires de physique théorique de trop grande taille ont de grandes difficultés à maintenir une interaction forte avec les pratiques expérimentales. On y observe fréquemment une tendance à la formalisation qui frêne les synergies nécessaires aux avancées dans les problématiques actuelles. Nous pensons que la taille actuelle du LPMMC est proche de la taille optimale pour mener une recherche de qualité sans s'isoler des autres laboratoires grenoblois. Nous souhaitons poursuivre nos collaborations avec les équipes à Grenoble (et hors de Grenoble) et prendre notre part de l'animation scientifique dans la communauté des physiciens. C'est aussi pour cette raison que le LPMMC soutient fortement la création d'une « plateforme théorie » au sein de son implantation actuelle, la Maison des Magistères Jean Perrin. Il s'agit de la création d'un espace dédié à l'animation scientifique en physique théorique au cœur du polygone Louis Néel. Ce projet est piloté par le LPMMC en étroite collaboration avec ses deux tutelles UJF et CNRS et concerne en première ligne les collègues théoriciens et expérimentateurs en matière condensée concernés par le projet de refondation. Cela assure également la cohérence de ce projet avec les projets immobiliers du CNRS d'une part (la surélévation des coursives C1-C4 joignant les bâtiments CNRS du Polygone dans le cadre de la refondation) et de l'UJF d'autre part (création sur le polygone Louis Néel d'un bâtiment dédié à l'enseignement doctoral). Les détails du projet « plateforme théorie », qui dépasse le cadre la physique de la matière condensée, sont présentés dans la section suivante.

Centre Théorique pour la Physique Grenobloise (CTPG)

Préambule

L'activité scientifique autour de la physique théorique et numérique à Grenoble implique une communauté d'environ 80 chercheurs, travaillant dans la plupart des cas dans de petites équipes (4-5 personnes). Cette communauté est répartie sur une quinzaine de laboratoires, situés sur le campus universitaire, en ville, et sur le polygone scientifique « Louis Néel ». Les tutelles concernées sont l'Université Joseph Fourier (UJF), l'Institut National Polytechnique de Grenoble (INPG), le Commissariat à l'Energie Atomique (CEA), et le Centre National de Recherche Scientifique (CNRS). L'activité de recherche en physique théorique recouvre les grands axes suivants (par ordre alphabétique): astrophysique, chimie théorique, matière condensée, matière molle, milieux dilués et/ou fluides, physique mathématique, physique non-linéaire, physique nucléaire, physique des particules/hautes énergies/astro-particules. Bien que ces axes soient assez divers, on peut identifier des techniques et des thématiques transversales s'appuyant sur plusieurs communautés comme par exemple la théorie des champs, les méthodes Monte Carlo, le bruit et la dynamique ou les systèmes à petit nombre de corps.

La communauté grenobloise des théoriciens est très intéressée par des activités regroupant plusieurs équipes et communautés comme le montrent l'existence à l'heure actuelle de groupes de travail impliquant physiciens et mathématiciens, d'un pôle chimie théorique (chimistes – astrophysiciens – mathématiciens), d'un séminaire théorique hebdomadaire en matière condensée ainsi que plusieurs ateliers et journées thématiques transversales qui ont eu lieu ces dernières années. Cependant, l'animation scientifique au sein de la communauté des théoriciens rencontre des difficultés à cause de la délocalisation des équipes et la séparation campus universitaire – ville – polygone « Louis Néel ». Le problème le plus évident est l'impossibilité de se regrouper partiellement et/ou temporairement sans infrastructure (bureau, poste de travail ...).

Pour répondre à ces besoins, le Laboratoire de Physique et Modélisation en Matière Condensée (LPMMC – UMR 5493) et plusieurs équipes grenobloises de physique théorique pilotent un projet intitulé « Centre Théorique pour la Physique Grenobloise » (CTPG) depuis le printemps 2004. Ce projet vise à augmenter la visibilité des théoriciens grenoblois: entre eux, vis-à-vis des collègues expérimentateurs, des tutelles, ainsi que sur le plan national et international. Le CTPG devrait proposer une animation scientifique locale, nationale et internationale, à travers une infrastructure appropriée avec un fonctionnement léger et flexible.

Le projet Centre Théorique pour la Physique Grenobloise est étroitement connecté au projet immobilier « Collège Doctoral et Ecoles Européennes sur le polygone Louis Néel » (CDEE@polygone), piloté par l'UJF. Il s'agit de la construction d'un bâtiment UJF sur le polygone Louis Néel qui intégrera notamment les besoins des Ecoles Doctorales (ED) de Physique et de Chimie-Biologie ; des Masters débouchant vers ces Ecoles Doctorales et des Ecoles européennes [HERCULES (grands instruments), ESONN (nano-sciences)]. Ce projet aura des conséquences

importantes pour la Maison des Magistères Jean Perrin, située sur le campus CNRS du polygone Louis Néel et où se trouvent à l'heure actuelle les administrations, les salles de cours et de travaux pratiques ainsi que la bibliothèque de l'ED de Physique et des Ecoles européennes (HERCULES, ESONN). Le projet CDEE@polygone envisage le déménagement de l'ensemble de ces structures dans le nouveau bâtiment UJF. L'espace ainsi libéré (environ 600 m²) à la Maison des Magistères sera occupé en partie (environ 100 m²) par le Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés pour répondre à ses besoins en m². Le reste (environ 500 m²) pourrait revenir en tant qu'« espace commun » à la physique théorique de Grenoble dans le cadre du projet CTPG.

Actuellement, l'UJF pousse fortement le projet CDEE@polygone pour lequel une étude de faisabilité a été effectuée par le cabinet lyonnais COUZANE. L'UJF souhaite présenter ce projet dans le cadre du CPER 2007. La convergence actuelle entre la vice-présidence de l'UJF (P. Bérard) et l'UFR de Physique (L. Puech), concernée au premier chef, crée une réelle opportunité pour le CTPG.

Le projet CDEE@polygone est élaboré en étroite concertation avec le CNRS-Grenoble (délégué régional et directeurs d'unité du polygone Louis Néel). Cela assure la cohérence de ce projet avec le projet actuel de refondation du polygone du CNRS, lancé cette année, et qui implique quatre laboratoires (Louis Néel, Cristallographie, LEPES et CRTBT) ainsi que des équipes du laboratoire de Spectrométrie Physique (UMR). Dans le cadre du projet de refondation une « plate-forme d'accueil de théoriciens invités et séminaires longue et moyenne durée » est prévue. Le CTPG jouera le rôle de cette plateforme pour la théorie de la matière condensée. Ainsi, le projet immobilier CDEE@polygone et le projet immobilier du CNRS (la surélévation des coursives (C1-C4) joignant les bâtiments CNRS du Polygone prévue dans le cadre du projet de refondation du CNRS) sont proposés par la concertation CNRS-UJF.

Projet d'animation scientifique en physique théorique

En attendant le développement du projet immobilier CDEE@polygone, qui s'inscrit dans le cadre du CPER 2007 et s'étale donc sur plusieurs années, nous souhaitons dorénavant et déjà lancer des actions scientifiques fédératrices d'animation scientifique en physique théorique. Ces actions pourraient avoir lieu dans des structures existantes (Maison des Magistères Jean Perrin principalement). Tout d'abord il s'agit de l'organisation, pour toute la communauté de théoriciens, d'un séminaire général régulier en physique théorique ainsi que des journées « théorie » annuelles. Mais on prévoit aussi

1. l'organisation de sessions thématiques de plusieurs semaines, où les participants occuperaient les locaux du Centre pendant la session, qui serait organisée autour d'une thématique transversale (séminaires, discussions, collaborations).
2. l'organisation de « rencontres réseaux », où le Centre pourrait accueillir les activités des réseaux présentant un intérêt direct pour la recherche théorique, notamment dans le cadre des projets grenoblois ou dans le cadre des réseaux (inter)nationaux (comme les GDR, réseaux européens) auxquelles participent les grenoblois.
3. l'hébergement de visiteurs & chercheurs en détachement. Le Centre n'a de sens que s'il permet d'inviter un nombre suffisant de visiteurs français et surtout étrangers, pouvant interagir avec plusieurs équipes locales. Le Centre peut aussi être un lieu pour développer une thématique émergente en accueillant des chercheurs en détachement souhaitant créer une nouvelle équipe.
4. l'organisation d'activités pour les (post)doctorants. Souvent, les (post)-doctorants théoriciens travaillent seuls dans une petite équipe. Des rencontres régulières entre (post)doctorants peuvent s'avérer déterminant pour leur formation.
5. l'organisation des actions de formation. Le Centre pourrait intervenir dans le cadre de plusieurs actions de formation dans le domaine de la physique théorique au sens large.
6. l'interaction théorie - expérience. Le Centre doit être un lieu pour les rencontres entre équipes théoriques et expérimentales afin de favoriser les collaborations. L'implantation de la Maison des Magistères Jean Perrin sur le polygone Louis Néel y est particulièrement favorable, surtout pour la matière condensée, qui constitue une communauté très importante.
7. l'animation (inter)nationale. Grenoble est attractif pour les visiteurs, du point de vue scientifique comme de celui de l'environnement naturel. Si besoin est, les locaux peuvent être utilisés pour des sessions thématiques internationales (comme au International Center for Theoretical Physics (ICTP) Trieste, au Institute for Theoretical Physics (ITP) Santa-Barbara, au Lorentz Centre de Leyde, au Newton Institute de Cambridge...). Les organisateurs intéressés doivent chercher des financements spécifiques (Europe, OTAN,...). On peut également penser aux rencontres internationales dans le cadre des réseaux européens auxquels participent les grenoblois.

Fonctionnement du CTPG

Le projet CTPG est piloté par un comité présidé par F. Hekking (professeur, LPMMC), dont les membres actuels sont Y. Colin de Verdière (professeur, Institut Fourier), D. Feinberg (directeur de recherche, LEPES), M. Klasen (professeur, LPSC), M. Lavagna (directrice de recherche, CEA), et P.Y. Longaretti (chargé de recherche, LAOG). Le comité a mis en place un site internet pour la physique théorique grenobloise, <http://lpsc.in2p3.fr/klasen/theorie/>. Ce site contient des informations importantes comme une liste de toutes les équipes grenobloises de physique théorique ainsi que leurs responsables, les différents séminaires théoriques réguliers, l'offre de postes ouverts (doctorants, post-doctorants, enseignant-chercheur,...). De plus, le comité organisera début 2006 une « journée de physique théorique » pour tous les collègues théoriciens, où les grands thèmes de physique théorique présents à Grenoble seront exposés. Ce sera également l'occasion d'échanger entre théoriciens et de faire l'inventaire des divers besoins par rapport au CPTG, afin que ses missions puissent être plus précisément identifiées.

Dans le cadre du quadriennal 2007-2010, le comité prépare une demande de reconnaissance d'une structure fédérative. Cette structure fédérative proposée sera dirigée par un bureau, dont les membres sont représentatifs pour la physique théorique grenobloise. En outre, un conseil scientifique international sera composé, qui donne son avis sur les actions scientifiques de la structure et qui s'exprime une fois par an sur les décisions importantes, comme par exemple les projets d'atelier scientifique à financer suite aux appels d'offre.

A. Théorie des systèmes mésoscopique : perspectives 2006-2010

Equipe proposée :

Frank HEKKING (PR)

Anna MINGUZZI (CR, interface avec l'équipe « ondes en milieu complexe »)

Fabio PISTOLESI (CR)

Peter SCHUCK (DR)

Pascal SIMON (MCF)

Visiteurs prévus:

Alex ZAZYUNOV (postdoc EUROSQIP, 2006/2008)

Les projets de recherche de l'équipe « théorie des systèmes mésoscopiques », tels qu'ils sont décrits ci-dessous, s'inscrivent tous dans le cadre de plusieurs collaborations, (inter)nationales et locales. Au niveau local il s'agit d'une part des collègues théoriciens au CEA (M. Houzet) et au CNRS (D. Feinberg et R. Mélin), d'autre part des collègues expérimentateurs au CEA (F. Lefloch et M. Sanquer) et au CNRS (C. Bauerle, V. Bouchiat, O. Buisson, H. Courtois, W. Guichard, L. Lévy, B. Pannetier, L. Saminadayar). La plupart de ces collègues participent dans le projet de refondation du CNRS-Grenoble. Une association formalisée de notre équipe avec les équipes concernées au sein de la nouvelle unité CNRS est donc prévue.

☉ = projet existant

▶ = projet à démarrer

☉ **Dynamique quantique dans les nanocircuits supraconducteurs**

(F. Hekking, A. Zyazunov)

La dynamique quantique des nanocircuits basés sur des jonctions Josephson est étudiée depuis plusieurs années au sein de l'équipe, voir aussi la Section II-1 de ce rapport scientifique. Ces études seront poursuivies lors du quadriennal 2007-2010 dans le cadre d'un projet intégré européen important intitulé EuroSQIP, qui a démarré novembre 2005 et dans lequel collaborent plusieurs équipes européennes travaillant sur le traitement de l'information quantique dans des nanocircuits supraconducteurs basés sur les jonctions Josephson. Dans le cadre de ce projet nous développerons plusieurs études théoriques, d'une part en étroite collaboration avec l'équipe expérimentale grenobloise au CRTBT et au LCMI (O. Buisson, W. Guichard et L. Lévy), d'autre part avec les partenaires européens du réseau EuroSQIP.

Le premier volet du projet concerne les études d'un SQUID dc comme système de base pour l'information quantique. Le SQUID est un système anharmonique à plusieurs niveaux quantiques. Nos calculs concernent différentes méthodes pour préparer, manipuler et mesurer les états quantiques d'un tel système. Nous étudierons non seulement l'effet de micro-ondes ou d'impulsions (de courant ou de flux magnétique) de courte durée, mais aussi la possibilité de manipuler le système de façon adiabatique. Cette dernière méthode, inspirée par la physique atomique, permet en principe d'effectuer des transitions très contrôlées entre les états quantiques du SQUID, tout en évitant les manipulations rapides, difficiles à effectuer avec précision expérimentalement. Mieux comprendre la physique associée aux manipulations d'états quantiques d'un SQUID est important pour le traitement de l'information quantique. Par exemple, nous souhaitons trouver les manipulations nécessaires pour stocker et retirer de l'information quantique d'un système quantique anharmonique (registre quantique). Nous souhaitons également comprendre si, avec un jeu d'opérations unitaires, ce système à plusieurs niveaux peut être utilisé pour effectuer des calculs quantiques.

Un deuxième volet du projet concerne les études théoriques des effets du bruit sur le comportement des nanocircuits supraconducteurs. D'une part le bruit mène aux phénomènes de relaxation et de décohérence qui limitent le fonctionnement correct du système quantique en tant que brique de base pour le traitement de l'information quantique. Bien qu'une compréhension générale de ces phénomènes de relaxation et de décohérence existe, certains effets, comme par exemple la visibilité limitée des oscillations cohérentes observées dans plusieurs systèmes supraconducteurs, ne sont pas bien compris à l'heure actuelle. D'autre part, ces nanocircuits quantiques sont proposés comme détecteurs potentiels des fluctuations quantiques engendrées par des sources particulières de bruit. Cela est intéressant dans le cadre des études du bruit non-gaussien engendré par certains conducteurs mésoscopiques comme par exemple une barrière tunnel ou un fil diffusif. Nous nous proposons d'étudier l'effet d'un bruit non-gaussien sur le comportement quantique des nanocircuits supraconducteurs. Nous nous attendons à ce que l'aspect non gaussien des fluctuations ait des conséquences importantes à fréquence élevée (à travers les

propriétés d'émission et d'absorption) comme à basse fréquence (variation adiabatique des paramètres du nanocircuit, se manifestant lors de mesures répétitives).

► Physique des structures hybrides métal normal - supraconducteur

(F. Hekking, F. Pistolesi)

A basse énergie, le transfert de quasiparticules dans les systèmes hybrides métal normal – supraconducteur (NS) est fortement supprimé par le gap supraconducteur. Seules les quasiparticules avec une énergie supérieure au gap peuvent passer du métal normal dans le supraconducteur. Ce phénomène peut être mis en œuvre afin de réaliser un *réfrigérateur* : en couplant un îlot normal à deux électrodes supraconductrices, les quasiparticules chaudes peuvent être évacuées de l'île normale sous l'action d'une tension appliquée aux électrodes. Il en résulte que l'îlot métallique est « refroidi », c.-à-d., qu'il se trouve dans un état hors-équilibre, caractérisé par une fonction de distribution électronique qui ressemble à celle d'un système à une température plus basse que la température du thermostat.

Notre équipe, et l'équipe de physique mésoscopique du CRTBT (H. Courtois et B. Pannetier) sont impliquées dans une collaboration européenne (universités de Helsinki, Pise, Eindhoven, Twente, Dublin) qui étudie la possibilité de réaliser un nouveau type de micro-réfrigérateur, basé sur les systèmes hybrides NS, dont les avantages sont sa petite taille, sa faible puissance et sa manipulation simple (en évitant des équipements lourds de cryogénie).

Dans le cadre de cette collaboration, nous nous proposons d'abord de développer des méthodes théoriques fiables qui permettent de calculer la fonction de distribution électronique d'un îlot métallique couplé par des interfaces plus ou moins transparentes à des électrodes supraconductrices. Pour cela il faut entre autre étudier les différents processus de relaxation se produisant dans les différentes parties du système hybride. Il s'agit notamment des processus électron-électron, électron-phonon, ainsi que électron-photon, qui, bien que connus, ne sont pas encore bien compris dans une petite structure hybride (taille finie de la partie normale, présence des interfaces,...). Outre le transfert de quasi-particules, il existe un deuxième processus de transfert de charge dans les systèmes hybrides : la réflexion d'Andreev. L'influence de ce processus sur la fonction distribution hors-équilibre de l'îlot métallique n'a pas non plus été bien étudiée jusqu'ici.

Afin de pouvoir estimer la performance de la structure hybride en tant que réfrigérateur, nous serons également menés à étudier les différents processus de transfert de chaleur. Dans ce cadre, nous étudierons la propagation de chaleur dans les structures hybrides, soit par les phonons, soit par les photons. Là encore il s'agit de sujets mal développés à l'heure actuelle. Un autre problème est celui de l'évacuation des quasiparticules chaudes dans les électrodes supraconductrices près de l'interface avec l'îlot. Ici il faut étendre la théorie bien connue des supraconducteurs hors équilibre pour y inclure entre autre les effets mésoscopiques de taille finie et des interfaces.

Un aspect expérimental important de ce projet concerne la mesure de la distribution électronique hors équilibre de l'îlot afin de caractériser la performance du réfrigérateur. Nous étudierons théoriquement la possibilité d'effectuer une thermométrie basée sur une mesure de la fonction spectrale du bruit en courant. Comme nous l'avons récemment démontré théoriquement, la fonction spectrale de bruit dans une structure hybride N-S dépend de la fonction de distribution électronique dans N.

Finalement, on s'attend à ce que la réalisation de ce type de réfrigérateur donne lieu à des températures plus basses que celles atteintes jusqu'ici pour ce type de système. Cela ouvre la voie pour étudier des phénomènes de physique fondamentale comme l'effet de proximité dans les jonctions NS ou encore la décohérence pour des températures plus basses que d'habitude.

► Physique mésoscopique avec les superfluides d'atomes froids

(A. Minguzzi, F. Hekking, F. Pistolesi, P. Schuck, interface équipe « ondes en milieu complexe »)

La superfluidité et la supraconductivité sont des effets de cohérence quantique sur une échelle macroscopique. Néanmoins, les progrès dans les techniques de nanofabrication (pour les supraconducteurs) et de confinement (pour les atomes froids) donnent une motivation pour étudier les configurations de dimensionnalité réduite, c'est-à-dire dans la limite où la taille du système devient comparable ou plus petite que la longueur de cohérence.

Dans cette limite dite *mésoscopique* une riche variété de comportements est attendue. Le confinement modifie de manière significative les propriétés physique du système : par exemple en dimensionnalité réduite la densité d'états, les exposants critiques, le rôle des interactions et la nature des transitions de phase sont différents. Les fluctuations jouent un rôle dominant.

Pour un gaz d'atomes fermioniques à deux composantes avec interactions attractives, une phase superfluide BCS avec appariement du type onde *s* est prévue à basse température. Les expériences ont récemment réalisé un

condensat de Bose-Einstein de dimères moléculaires et grâce à un changement de la constante de couplage arrivent à s'approcher du régime BCS.

Nous nous proposons d'étudier deux aspects mésoscopiques de la superfluidité des atomes froids :

1. *Superfluides dans un piège harmonique.* Des systèmes avec de petits nombres d'atomes (de l'ordre de quelques centaines) peuvent être réalisés avec de micro-pièges ou dans les minima d'un réseau optique avec de hautes barrières. Pour de forts confinements la température critique est à la portée des expériences. Comme pour les grains mésoscopiques supraconducteurs, pour ces systèmes l'effet des fluctuations peut devenir pertinent. On se propose d'élucider l'effet des fluctuations sur plusieurs observables d'intérêt expérimental. Comme premier pas, en collaboration avec R. Fazio de la *Scuola Normale di Pisa*, nous avons estimé la taille des fluctuations et la dépendance spatiale avec une technique d'intégrales fonctionnelles. Nous avons ainsi évalué la fonction de corrélations densité-densité.

L'équivalent d'une jonction entre un métal normal et un supraconducteur peut être réalisé en induisant une transition atomique entre l'état superfluide et un autre état interne (normal) des atomes. Nous nous proposons d'étudier le courant à travers une telle jonction. On s'attend à ce que ce courant soit affecté par les fluctuations.

2. *Réflexion d'Andreev.* Dans le cas de la jonction normal-superfluide réalisée avec les atomes froids il est intéressant d'explorer la possibilité d'observer des signatures de la réflexion d'Andreev. Pour sa description on peut se baser sur des méthodes bien connues, comme par exemple celle développée par Blonder, Tinkham et Klapwijk.

☺ Les systèmes nano-électromécaniques supraconducteurs

(F. Pistolesi)

Des navettes de charge constituées de métal normal ont pu être fabriquées et mise en mouvement par une force externe [D.V. Scheible, R.H. Blick, *Appl. Phys. Lett.* **84**, 4632 (2004)]. Il ne semble pas insurmontable de les réaliser à nouveau à partir de métaux qui deviendront supraconducteurs à basse température. Dans ce projet nous formulons de nouvelles propositions de navettes de charge hybrides supraconductrices/métalliques normales et nous étudions leurs propriétés.

La navette de charge constituée de métaux normaux a désormais fait l'objet de nombreuses études théoriques. L'instabilité mécanique a été démontrée tant dans le régime classique que quantique. A basse température, les électrodes métalliques peuvent devenir supraconductrices. Il est donc naturel d'envisager la possibilité de navettes de charges supraconductrices où le passage du courant se fait *via* un état enchevêtré dans l'île centrale pour maintenir la cohérence quantique entre les électrodes. A ce jour, le maintien de cette cohérence quantique entre les deux électrodes supraconductrices a été démontré théoriquement [LY Gorelik *et al*, *Nature* **411**, 454 (2001)]. Les oscillations de l'île centrale sont donc compatibles avec un courant Josephson si une différence de phase est établie entre les deux supraconducteurs. Mais, contrairement aux navettes métalliques normales, *aucune analyse de stabilité* n'a été menée à ce jour.

Dans un premier temps, nous effectuerons une telle analyse dans la navette de charge Josephson. En l'absence d'une différence de potentiel entre les électrodes, il n'y a pas de champ électrique entre les supraconducteurs. Nous étudierons si le couplage Josephson suffit à produire l'oscillation. Ensuite, si une différence de potentiel est appliquée, nous nous attendons à ce que l'oscillation de l'île soit générée par le même mécanisme électrostatique à l'origine de l'instabilité de navette de charge. Nous ferons l'analyse de cette instabilité d'un nouveau genre. En effet, dans la jonction mise sous tension, un effet Josephson alternatif se développe et impose une fréquence d'oscillation du courant contrôlée par la tension. Le couplage entre deux fréquences (fréquence propre d'oscillation de l'île et fréquence Josephson) dans ce système fortement non linéaire générera certainement de nouveaux effets. En particulier il sera très important d'étudier l'effet forçant de l'oscillation du courant Josephson quand sa fréquence coïncide avec la fréquence de résonance mécanique.

Dans des structures hybrides, le transfert de charge s'effectue par réflexion d'Andreev : un électron est réfléchi comme trou à l'interface entre le métal normal et le supraconducteur. Le trou qui est le renversé du temps de l'électron retrace son chemin en sens inverse. Si le transport est cohérent, les phases aléatoires dans la probabilité de transfert de charge se compensent, ce qui permet d'observer une forte dépendance en énergie de la transparence de l'interface. La caractéristique courant-tension qui en résulte est fortement non linéaire. Le temps typique de transit des électrons dans l'île peut atteindre la nanoseconde, ce qui est comparable aux temps de décohérence et d'oscillation mécanique. Nous nous attendons donc à ce que l'interférence soit fortement et nous analyserons les effets importants attendus sur la conductance de ces structures hybrides.

► Interaction des modes collectifs électroniques et électromagnétique avec les modes élastiques

(F. Pistolesi)

Très récemment, une réalisation possible de la navette de charge a été proposée en utilisant un nanotube de carbone suspendu et fixé à ses deux extrémités [L. M. Jonsson, *et al.*, cond-mat/ 0503497]. Si on positionne une pointe AFM (Atomic Force Microscope) près du centre du nanotube, un courant peut passer par effet tunnel entre la pointe et le nanotube. Les électrons dans la pointe ont une plus grande probabilité de le faire quand le nanotube est proche de la pointe. Une corrélation entre l'état de charge du nanotube et sa position est donc induite. En général, le nanotube est accéléré par le champ électrique de la pointe et, si la dissipation est suffisamment faible, une instabilité mécanique analogue à la navette de charge peut se produire.

Seul un cas simple a été étudié pour l'instant. Le nanotube est décrit comme un conducteur parfait ; la capacité et la résistance des contacts entre le nanotube et les électrodes sont les seuls ingrédients pris en compte. Mais les fréquences d'oscillation du nanotube sont très élevées (un nanotube de 100 nm devrait osciller à une fréquence de l'ordre de 3 GHz). Dans ce cas, la structure interne du nanotube ne peut pas être négligée. En effet, le transport de charge dans le nanotube se fera par excitation de modes collectifs électroniques (plasmons) ou électromagnétiques (qui font intervenir l'inductance et la résistance du tube). En général cela entraîne un retard du transfert de charge. Mais quand les fréquences de résonance électroniques sont proches des fréquences de vibration, de nouveaux phénomènes peuvent se produire. En particulier ces modes électroniques vont fortement influencer la caractéristique courant-tension du dispositif.

Afin de décrire ce phénomène, on généralisera la théorie développée pour le blocage de Coulomb en y incluant la propagation des modes élastiques. En effet, lorsque un électron pénètre par effet tunnel dans un conducteur il excite les modes électromagnétiques du conducteur qui se propagent de façon diffusive et peuvent interagir avec la propagation diffusive électronique. Dans ce contexte l'effet des excitations élastiques macroscopiques, comme l'oscillation du nanotube, ne peuvent plus être négligés. Nous développerons une théorie capable de prendre en compte tous ces effets. L'approche semiclassique s'est révélée très fructueuse pour les systèmes mésoscopiques désordonnés [G.L. Ingold, Y. Nazarov, *edited by H. Grabert and M.H. Devoret*, Plenum Press, New York (1992)] et nous étudierons son éventuelle généralisation.

Dans les nanofils sans désordre, une extension de la théorie des liquides de Luttinger sera proposée pour prendre en compte le couplage entre les fluctuations de densité de charge dans le nanotube et les fluctuations élastiques collectives.

► Modes collectifs élastiques : vers des phonons autoentretenus ?

(F. Pistolesi)

Il est déjà possible de construire des structures nano-électromécaniques complexes où plusieurs parties mobiles sont couplées, soit par l'effet des champs électriques, soit par transfert de charge. Par exemple, on peut suspendre plusieurs nanotubes de carbone entre deux électrodes. Si la distance entre les tubes est de l'ordre du nanomètre, les énergies de couplage électrostatique deviennent du même ordre que les énergies de Coulomb dans les grains métalliques de taille nanométrique. A basse température, ces effets vont donc être importants pour déterminer la dynamique de vibration des nanotubes.

Plusieurs modes d'oscillation peuvent être envisagés en fonction de l'état de charge des nanotubes. Or, la présence de résonances dans les systèmes couplés élastiques-électroniques influence le passage des charges. Ce phénomène est connu sous le nom de *phonon-blockade* [E. M. Weig, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 046804 (2004)]. Dans le cas que nous considérons, comme l'interaction coulombienne est à longue portée, les modes collectifs sont non seulement excités, mais aussi fortement modifiés par le passage des électrons. Nous étudierons la (riche) physique qui en résulte.

Une deuxième possibilité encore plus excitante sera de considérer le cas où les différentes parties mobiles sont suffisamment proches pour que les électrons puissent passer de l'une à l'autre par effet tunnel. Comme la probabilité de transfert de charge dépend fortement de la position, on s'attend à trouver des instabilités mécaniques analogues à la navette de charge. Mais, cette fois, il s'agira d'instabilités vers des modes collectifs de vibration. Un tel effet pourrait augmenter le courant électrique induit et rendre le phénomène plus facilement observable.

☉ Spintronique, effet Kondo et décohérence

(P. Simon)

L'utilisation du spin d'une boîte quantique comme qubit élémentaire semble une solution prometteuse pour réaliser de l'information quantique en couplant plusieurs boîtes quantiques. Dans ce type de schéma, l'effet Kondo est plutôt une nuisance dans la mesure où l'on veut éviter que les spins soient écrantés. Néanmoins on peut tirer profit de l'effet Kondo pour faire de l'électronique de spin à partir de boîtes quantiques couplées capacitivement dans lesquelles les degrés de liberté de charge sont intriqués avec les degrés de liberté de spin. En collaboration avec D. Feinberg (LEPES), nous avons proposé certaines applications de cette idée. Nous envisageons d'étudier d'autres applications comme la réalisation de différentes portes logiques. Une question majeure est également d'étudier la décohérence dans ce type de système. Cette question est en fait beaucoup plus large et suscite un énorme engouement dans la communauté: il s'agit de la décohérence d'un système à deux niveaux (un qubit donc) couplé à un environnement complexe (ici un bain électronique et un ou plusieurs bains bosoniques). Cette question est également prépondérante dans la physique des fermions lourds et des points critiques quantiques

► Cohérence dans les systèmes à plusieurs impuretés: vers la phase verre de spin

(P. Simon)

Avec les progrès en nanolithographies ou bien dans les techniques de STM, les expérimentateurs sont maintenant capables de réaliser et d'étudier des systèmes à impuretés magnétiques. Cela permet de revisiter de manière plus systématique et approfondie les systèmes à faible nombre d'impuretés. Ces impuretés peuvent interagir entre-elles soit par couplage tunnel soit par un couplage de type RKKY. On peut s'attendre à de nombreuses nouvelles phases exotiques, phases qu'il semble difficile à investiguer dans les matériaux. Nous envisageons donc d'étudier des systèmes à plusieurs impuretés et la signature en transport de ces nouvelles phases.

Une autre approche expérimentale des systèmes à plusieurs impuretés consiste à partir d'un métal relativement propre et d'implanter des impuretés magnétiques. Les principaux paramètres sont alors la température Kondo des impuretés et leur densité, ainsi que le libre parcours moyen élastique. Les mesures de type localisation faible permettent d'extraire le temps de cohérence quantique. Néanmoins ces mesures supposent que désordre et effet des impuretés sont relativement indépendants ce qui n'est pas évident. Nous aimerions comprendre comment impuretés magnétiques et désordre cohabitent, plus exactement quelle est leur influence mutuelle. A forte densité, on peut s'attendre à une phase de type verre de spin. Néanmoins, le transport dans les phases de spin quantique est un domaine de recherche quasi vierge que nous aimerions attaquer à moyen terme.

► Transport de spin dans les molécules

(P. Simon)

L'électronique moléculaire est une discipline en plein essor tant sur le plan expérimental que théorique. Les applications industrielles sont évidemment importantes. Lorsqu'une macro-molécule organique est contactée entre deux réservoirs métalliques, on observe non seulement des pics de conductance mais également une résonance liée à l'effet Kondo. Ceci prouve, d'une part que le transport électronique est cohérent, et d'autre part qu'un état lié électronique à N corps subsiste malgré les nombreuses excitations de type phononiques. On aurait pu, en effet, s'attendre à ce que les phonons dominent à basse énergie et empêchent la formation d'une résonance de type Kondo. Nous aimerions donc étudier la coexistence de ces deux phénomènes. Il semble notamment intéressant d'étudier les effets de feed-back entre l'effet Kondo et le bain de phonons.

Une autre voie de recherche intéressante concerne le transport à travers des molécules magnétiques. En général ces molécules peuvent posséder des spins relativement grand.

Les transitions magnétiques, notamment la dynamique de retournement du spin, ont été fortement étudiées sur des molécules isolées. Quant est-il sur des molécules connectées à des réservoirs métalliques. Des expériences vont commencer dans cette direction à Grenoble.

Le domaine est quasi vierge au niveau théorique. Aura-t-on un écrantage partiel de leur spins, comment est affectée leur dynamique, quel est le rôle joué par les spins nucléaires, prépondérant à l'état de cristal isolé ? Nous envisageons à moyen terme de nous attaquer à ces questions en collaboration avec les expérimentateurs locaux.

B. Ondes en milieu complexe : perspectives 2006-2010

Equipe proposée :

Sergey SKIPETROV (CR)

Vincent ROSSETTO-GIACCHERINO (CR)

Roger MAYNARD (PR émérites, président de la SFP)

Bart VAN TIGGELEN (DR, responsable)

Anna MINGUZZI (CR, interface avec l'équipe « mésoscopie théorique »)

Domitille ANACHE (thésarde/Monitrice ENS)

Visiteurs prévus:

Andreas LUBATSCH (postdoc CNRS 2005/2006)

Bernard KAAS (thésard Amsterdam, co-tutelle avec Ad Lagendijk)

Olivier MERCHIERS (thésard, Université de Cantabrie-Espagne, échange bilatérale).

☺ = projet existant

▶ = projet à démarrer

▶ Physique mésoscopique avec les atomes froids

(Minguzzi, Skipetrov, Van Tiggelen, interface équipe « mésoscopie quantique » : Hekking et Pistolesi)

En 2005, Anna Minguzzi a été recrutée en tant que CR2 par la section 06 au LPMMC. Elle fera une interface avec l'équipe « mésoscopie quantique » de Hekking. C'est l'étude théorique et numérique des bosons froids dans un potentiel « optique » désordonné qui est à la compétence de l'équipe « ondes en milieux complexes ».

Récemment, des réseaux optiques ont été générés par l'intersection de différents faisceaux lasers contre propageant. Cela donne une réalisation presque parfaite du modèle de Mott-Hubbard. En présence de désordre une phase localisée de type « Anderson » est prévue. La définition précise de la localisation forte a toujours été délicate et controversée, et les atomes froids ne feront pas exception. On étudiera donc les différentes propositions dans la littérature dans un contexte des atomes froids. Ensuite, un calcul propre du libre parcours moyen des atomes est prévu. La théorie « selfconsistante » de la localisation forte telle qu'elle a été récemment adaptée par Skipetrov et Van Tiggelen enfin de modéliser la dynamique en milieu fini et ouvert, pourrait être appliquée aux gaz d'atomes froids.

La richesse de la localisation forte des atomes froids est la non linéarité induite par les interactions inter-atomiques et contrôlable par les résonances de Feshbach. Les interactions, modélisées par exemple par l'équation Gross-Pitaevski, ont été cruciales pour comprendre la condensation de Bose dans un piège. On pourrait même envisager un cross-over dimensionnel. La localisation forte est très sensible à la dimensionnalité du gaz. La combinaison du désordre et de la nonlinéarité est une occasion unique d'étudier les instabilités dynamiques prévues théoriquement par Skipetrov et Maynard en 2000.

▶ Diffusion multiple et ses applications en imagerie.

(Rossetto, Skipetrov, Van Tiggelen)

Collaboration externe : Georg Maret et Thomas Gisler (Université de Konstanz, Allemagne)

Mr. Rossetto a été recruté par la section 05. Son projet de recherche porte sur l'étude de la polarisation optique dans différents milieux « complexes », et plus particulièrement les milieux biologiques. Un concept central sera la phase de Berry.

Côté fondamental on essayera de comprendre la relation entre l'effet Hall photonique et la phase de Berry, qui trouvent tous les deux leur origine dans la polarisation. Un effet Hall de spin a été récemment observé pour les électrons dans des semi-conducteurs (Hirsch, Phys. Rev. Lett. 1999), ainsi qu'un effet Hall «optique», que l'on interprète comme un effet du couplage spin-orbite de photons dans le cadre de l'approximation de l'optique géométrique (Bliokh et Bliokh, 2004). On envisage d'étudier la relation entre les différents phénomènes, avec l'espoir de formuler une théorie mésoscopique de la polarisation, qui tiendra compte de la polarisation et toutes ses manifestations, comme la phase de Berry et son interaction avec un champ magnétique. Evidemment, une interface

se présente ici avec les projets en magnéto-optique, et une « expérience de spin optique » à Toulouse (LCMP, équipe de Rikken) n'est pas exclue.

Le calcul de la phase géométrique des photons en diffusion multiple est la partie la plus difficile, car aucune formule simple n'est pertinente pour son évaluation analytique. Les simulations numériques seront basées sur un algorithme de Monte-Carlo qui reproduit des marches aléatoires avec contraintes. Ces études statistiques pourront être étendues aux milieux anisotropes (chiraux ou sous champ magnétique).

À l'heure actuelle aucune des méthodes d'imagerie ne prend en compte explicitement la polarisation. Il est bien connu que l'anisotropie et la chiralité laissent leur trace dans le degré et la nature de la polarisation. On essaiera de quantifier ces effets en diffusion multiple en utilisant la phase géométrique de Berry. Il est vraisemblable que les résultats obtenus auront un impact dans d'autres domaines de la physique. La géométrie d'observation en sismologie et la polarisation sismique sont des éléments favorables à l'observation d'une phase sismique de Berry.

Dans le cadre de la collaboration avec l'équipe de Georg Maret et Thomas Gisler à l'Université de Constance, nous avons déjà démontré que la spectroscopie des ondes diffusées (« diffusing-wave spectroscopy », DWS) peut être utilisée pour détecter l'activité cérébrale chez l'homme de façon non invasive, à travers la peau et le crâne. Les signaux DWS des expériences précédentes sont, toutefois, principalement dus à l'intensification de courants sanguins dans la zone cérébrale activée. Bien que cette intensification soit un signe incontestable de l'activité, c'est un signe secondaire. Notre projet actuel consiste à utiliser la DWS pour mettre en évidence l'activité de neurones directement. Pour que le signal DWS soit dû à l'activité de neurones et pour qu'il ne soit pas masqué par l'écoulement sanguin, les mesures doivent être effectuées pendant une période très courte (< 100 ms) après le début de l'activité, car les courants sanguins mettent plus de 100 ms pour s'adapter à l'activité cérébrale locale. L'interprétation des données demandera un modèle plus sophistiqué de la tête humaine car les signaux attendus sont plus faibles (par exemple, il faudra inclure la couche de liquide cébrospinal entre le crâne et le cortex que l'on a négligé jusqu'à présent). De l'autre côté, la dynamique des écoulements sanguins devra être modélisée de façon plus précise pour pouvoir détecter l'activité neuronale propre sur leur fond.

☉ **Mésoscopie des ondes sismiques**

(Van Tiggelen, Anache)

Collaboration : Michel Campillo, Ludovic Margerin, Philippe Roux (LGIT).

Les projets sismiques seront poursuivis avec une collaboration renforcée. Domitille Anache a été recrutée en tant que thésarde /monitrice ENS. Philippe Roux (CR, ancien membre du LOA-ESPCI) s'est mobilisé à Grenoble et s'est installé au LGIT dans l'équipe de Michel Campillo et Ludovic Margerin. Il sera probablement complété par Julien de Rosny (CR au LOA-ESPCI) en 2007. La collaboration est soutenue par un Plan Pluri Formation, activé en 2005. L'enjeu sera de (continuer à) mener une approche mésoscopique à la propagation des ondes sismiques, à la fois théorique, numérique et expérimentale, et avec une interface très étroite avec les expériences ultrasonores, dont Roux est un spécialiste mondial.

Domitille Anache étudiera la théorie de la spectroscopie de phase des ondes sismiques, et notamment le rôle de la conversion de mode P/S lorsqu'on change la température. Un deuxième défi sera de continuer et de perfectionner les expériences en vraie grandeur. Plus particulièrement on compte étudier la statistique de la phase sismique (sa distribution et ses corrélations) qui n'a jamais fait l'objet d'une étude mésoscopique, même pas en acoustique. Une première version de la théorie est déjà disponible. Elle montre la possibilité de mesurer directement le libre parcours moyen des ondes sismiques.

☉ **Localisation d'Anderson**

(Skipetrov, Van Tiggelen)

La théorie de localisation d'Anderson que nous avons développée précédemment nous a permis d'expliquer certains résultats expérimentaux et de faire des prédictions théoriques très intéressantes qui peuvent guider les futures expériences dans les domaines optiques et micro-ondes. Nous envisageons de continuer à travailler sur cette théorie et sur son adaptation aux conditions d'expériences réelles. En outre, il est intéressant d'appliquer cette théorie aux ondes d'une autre nature — on a déjà évoqué les atomes froids, mais on peut penser également aux ondes sismiques, par exemple — et d'étudier les conséquences de la localisation d'Anderson sur les observables sismiques. Il est établi maintenant que les ondes sismiques sont diffusées multiples par les hétérogénéités de la croûte [R. Hennino *et al. Phys. Rev. Lett.* **86**, 3447 (2001)]. La localisation faible des ondes sismiques — le précurseur de la localisation d'Anderson — a été récemment observée [E. Larose *et al. Phys. Rev. Lett.* **93**, 048501 (2004)] Il n'est donc pas impossible que dans certaines régions (en particulier, à proximité de volcans) et pour les ondes de certaines fréquences la diffusion peut être suffisamment forte pour que les effets de la localisation d'Anderson soient observables.

► Laser Aléatoire

(Lubatch, Skipetrov, van Tiggelen)

Depuis le premier article de Lawandy *et al* (Nature **368**, 436, 1994), l'effet laser a été étudié en milieu aléatoire. Ce sont les chemins aléatoires mais longs, et peut-être même des états localisés (des cavités aléatoires) qui fournissent presque "gratuitement" le *feedback* nécessaire pour compenser les pertes dues à l'émission spontanée. L'existence de cet effet montre que les milieux désordonnés sont parfois très utiles. Beaucoup de simulations numériques et beaucoup d'expériences ont été effectuées, notamment aux Etats-Unis (Cao *et. al.*, Phys. Rev. Lett. **86**, 4524, 2001 ; Soukoulis *et.al.*, Phys. Rev. Lett. **85**, 70, 2000), aux Pays-Bas (Van Soest *etal*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1522, 2001) et au Laboratoire de Physique de la Matière Condensée à Nice (Patrick SEBBAH et Christian VANNESTE, Phys. Rev. Lett. **87**, 183903, 2001). Les simulations numériques ne règlent pas toujours les questions de base : Quel mode "lasera" au premier et pourquoi ? Faut-il des états localisés, ou est-ce que les états diffus avec un temps de retard élevé suffiront....?

Il est clair que la thématique jouera un rôle important pour la propagation de la lumière en milieu désordonné, avec des applications potentielles. On profitera de la présence de Lubatch, présent en tant que Postdoc CNRS pour une année, qui a soutenu un thèse sur la théorie des milieux hétérogènes soumis au gain, pour mieux comprendre la théorie de l'effet laser aléatoire.

☉ Optique non linéaire dans les milieux désordonnés

(Sergey Skipetrov)

Collaboration externe : Vlad Yakovlev (Université de Wisconsin, Etats-Unis), Leonid Golovan (Université de Moscou)

De nombreuses expériences récentes ont montré que les processus optiques non linéaires (la génération d'harmoniques, par exemple) sont affectés par le désordre de façon non triviale [Mel'nikov *et al. Appl. Phys. B* **79**, 225 (2004); Baudrier-Raybaut *et al. Nature* **432**, 374 (2004)]. Dans des poudres semi-conductrices, dans de semi-conducteurs poreux, ou dans des suspensions de particules micro- et nanométriques le désordre peut induire une augmentation de quelques ordres de grandeurs de l'efficacité des processus non linéaires par rapport au milieu homogène. Ce résultat est contre intuitif et demande une compréhension théorique plus profonde. Très récemment nous avons démarré une collaboration avec l'équipe de Prof. Yakovlev (Université de Wisconsin, Etats-Unis) qui vise à comprendre le rôle du désordre en optique non linéaire en comparant les résultats de expériences avec la théorie. Dans un premier temps, nous envisageons de développer (1) un modèle de milieu effectif et (2) un modèle de diffusion simple pour décrire la génération d'harmoniques dans des suspension de particules diélectriques nanométriques. Puis le rôle de la diffusion multiple et de la localisation d'Anderson sera examiné.

☉ Thermodynamique de nanosystèmes

(Skipetrov)

Collaboration externe : Olivier Bourgeois (CRTBT, Grenoble)

Nous envisageons de continuer notre collaboration avec Olivier Bourgeois (CRTBT, Grenoble) pour mieux comprendre le comportement thermodynamique et thermique des échantillons supraconducteurs et métalliques de taille nanométrique (disques et anneaux). Dans le cas de supraconducteurs, les résultats des expériences (chaleur spécifique en fonction de champ magnétique appliqué) vont être confrontés aux calculs basés sur la théorie de Ginzburg-Landau. Dans le cas de métaux, les variations de la chaleur spécifique sont directement liées aux courants permanents qui se créent spontanément à basse température. Ces courants permanents ont été étudiés précédemment par mesures d'aimantation, mais un désaccord existe toujours entre l'expérience et la théorie car les courants permanents mesurés sont 10-100 fois plus forts que la prédiction de la théorie [Lévy *et al. Phys. Rev. Lett.* **64**, 2074 (1990)]. Une explication possible de cette contradiction est que les courant mesurés ne sont pas « permanents » mais sont dus à la rectification de fluctuations ambiantes, rendue possible par la non linéarité de la réponse de l'échantillon au champ électromagnétique extérieur en présence simultanée du désordre et du champ magnétique constant [Kravtsov et Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3394 (2000)]. Les mesures thermiques (mesures de la chaleur spécifique) représentent un moyen unique pour pouvoir distinguer les courants permanents (non dissipatifs) de courants hors équilibre thermodynamique (et par conséquent dissipatifs) car ils doivent avoir des impacts très différents sur le signal mesurés.

► Communication quantique en milieux désordonnés

(Skipetrov, Maynard)

Le problème principal de la théorie de communications quantiques est d'estimer la quantité d'information qui peut être transmise à travers un canal quantique défini par le type de particules disponible, leur nombre, leur énergie, et

leurs interactions avec le milieu physique dans lequel elles se propagent. La différence majeure entre un canal quantique et un canal classique (c'est-à-dire un canal où l'information est transférée par les ondes classiques) vient du fait que dans un canal classique (1) la fréquence et l'énergie totale (ou puissance) de signaux sont deux variables indépendantes et (2) la capacité n'est finie qu'à cause du bruit extérieur, tandis que dans un canal quantique (1) la fréquence et l'énergie de signaux sont directement liées par la relation d'Einstein et (2) la capacité est finie même en absence du bruit extérieur en raison des fluctuations quantiques de vide qui limitent l'efficacité de communication. Bien que les canaux de communication quantique soient étudiés depuis plusieurs dizaines d'années, on connaît toujours très peu sur leur fonctionnement en présence de désordre. Les questions ouvertes sont les suivantes : Dans quelle mesure le désordre dégrade-t-il la capacité de communication ? Peut-on minimiser cette dégradation et comment ? La communication quantique en régime de localisation d'Anderson est-elle possible ? De point de vue de la thermodynamique, les notions de l'information et de l'entropie sont directement liées. En même temps, l'efficacité de transfert de l'entropie gère la conductivité thermique d'un système. Tout cela montre que le problème de communication quantique est lié au problème de conductivité thermique en physique des solides. Ce dernier problème a sollicité beaucoup d'intérêt récemment, après l'observation du « quantum de conductivité thermique » [Schwab *et al. Nature* **404**, 974 (2000)]. Notre travail théorique peut donc aussi avoir une validation expérimentale dans le contexte de transport thermique dans les systèmes désordonnés.

► **Optique quantique en milieu désordonné**

(Skipetrov, Van Tiggelen)

Collaboration externe : Frank Scheffold (Université de Fribourg, Suisse)

Bien que la lumière multiplement diffusée soit souvent traitée comme une « onde classique », elle n'en sera pas une. Un détecteur photoélectrique enregistre une onde lumineuse comme une séquence de « clicks » discrets, chaque click étant associé à l'arrivée d'un photon – une quasi-particule qui porte une énergie $\hbar\omega$. La nature quantique de la lumière a conjecturée il y a 100 ans par Einstein [*Ann. Phys.* **17**, 132 (1905)], mais, bizarrement, les propriétés quantiques de la lumière en milieu désordonné n'ont reçu attention que très récemment [Lodahl et Lagendijk, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 153905 (2005)]. En collaboration avec l'équipe de Frank Scheffold à l'Université de Fribourg nous sommes en train d'étudier la statistique de comptage de photons – la probabilité $P(n, T)$ de détecter n photons pendant un intervalle de temps T . Pour une source des ondes cohérentes (laser) dans un milieu homogène cette probabilité est Poissonienne car les photons arrivent indépendamment les uns après les autres. Dans un milieu désordonné, par contre, des déviations de la distribution de Poisson doivent être observées parce que les photons peuvent se croiser dans le milieu et les temps d'arrivée de photons deviennent corrélés (les photons arrivent « en équipes » — « photon bunching »). Ces déviations doivent être d'autant plus importantes que la diffusion est forte. Nous nous attendons à un changement complet de la distribution lorsque le régime de localisation d'Anderson est atteint. La statistique de comptage de photons porte donc l'information sur le régime de propagation de lumière en milieu désordonné.

L'étude de $P(n, T)$ devient encore plus intéressante lorsque l'onde incidente n'est pas dans un état cohérent (laser), mais dans un des états dits « quantiques » : état de Fock, état « squeezé », etc. Dans ce cas son interaction avec le milieu désordonné représente un problème fondamental de physique dont la solution n'est pas connue pour le moment. Nous envisageons une étude à la fois théorique et expérimentale de ce problème sur les stades plus avancés de ce projet.

☉ **Magnéto-optique : « l'effet Feigel »**

(Van Tiggelen)

Collaboration : Geert Rikken, Voislav Krstic (LCMP-Toulouse)

Une demande de crédits a été déposée auprès de l'ANR pour soutenir la collaboration en magnéto-optique. L'objectif de ce projet est l'étude expérimentale et théorique du transfert de quantité de mouvement d'un champ de radiation aux matériaux qui sont variés soit sous la symétrie de renversement de temps, soit sous la symétrie miroir, et notamment sous les deux. La matière qui brise une de ces deux symétries montre des anisotropies observables dans les propriétés optiques. Un exemple récent concerne les matériaux chiraux, qui brisent intrinsèquement la symétrie miroir. Pour briser la symétrie de renversement du temps, un champ magnétique supplémentaire peut être appliqué.

Il a été établi que les matériaux chiraux soumis à un champ magnétique montrent des anisotropies optiques ou électroniques significatives connues de nos jours comme l'*anisotropie magnétochirale*. Celles-ci ont été observées (entre autre par nous) en luminescence, en biréfringence, en dichroïsme, et dans des réactions photochimiques, ainsi que dans le magnéto-transport photonique et électronique. L'anisotropie se manifeste dans des matériaux *magnétochiraux* par le fait que la quantité physique en observation dépend du produit scalaire du vecteur de champ magnétique et du vecteur d'onde de la « particule », par exemple en cas de la magnétorésistance électronique la quantité de mouvement des électrons, ou en cas de l'indice optique de réfraction ce sera le vecteur d'onde d'un

photon. En conséquence, la quantité physique observée n'a pas la même valeur si la quantité de mouvement est parallèle ou antiparallèle au champ magnétique externe – et une anisotropie est établie.

Basé sur des considérations théoriques récentes, le but de notre projet de recherche est de mesurer le transfert de quantité de mouvement du champ de radiation aux matériaux magnétoélectriques et magnétochiraux. L'étude comprend l'application de différents champs de radiation (par ex., le rayonnement du corps noir, la radiation monochromatique mais isotrope), des variations de champ magnétique et électrique externes en puissance et en fréquence (réorientation de l'axe magnétique/électrique), élaborant des influences de température aussi bien que des dépendances de la longueur d'onde optique dans le processus du transfert. Les matériaux magnétochiraux à étudier sont conçus spécialement via l'évaporation oblique sur des substrats tournants, alors que les matériaux magnétoélectriques sont soit facilement synthétisés soit commercialement disponibles. Le transfert de la quantité de mouvement sera mesuré via une technique de mesure de moment de torsion mécanique, basée sur les cantilevers piezo-résistifs.

L'enjeu théorique sera de fournir une équation classique de mouvement pour un objet magnétoélectrique sous radiation. Une expression dans l'approximation de Born a été déjà proposée, et on cherche maintenant à aller au-delà. Un deuxième défi théorique sera de modéliser l'anisotropie magnétoélectrique dans un milieu désordonné. Dans ce milieu la propagation de la lumière est diffuse, et on s'attend que le transfert de la quantité de mouvement s'annule. Ou non? Une occasion de créer de la quantité de mouvement de nul part? Enfin, on souhaite comprendre l'effet magnétoélectrique plus au niveau de la mécanique quantique, en étudiant les différents coefficients d'Einstein pour une molécule soumise aux champs externes.

C. Système d'information et aspects numériques : perspectives 2006-2010

Responsable technique : F. Berthoud

La croissance et l'évolution des besoins informatiques en terme de connectivité, bureautique, calculs fera certainement l'objet de plusieurs réajustements en fonction du développement du pôle théorique soutenu par le laboratoire, mais aussi en fonction du développement des aspects numériques au sein du laboratoire et ce, dans le contexte de la refondation du polygone. Ces incertitudes nous conduisent à présenter des perspectives autour de deux aspects principalement : les aspects numériques et le système d'information du laboratoire, sachant que les développements attendus seront effectifs même si le siège du(es) projet(s) n'est plus le laboratoire.

Rappelons brièvement que le LPMMC se situe dans un bâtiment de l'UJF, lequel est localisé sur un campus CNRS. Cette situation particulière induit une répartition des interventions de la gestion réseau quelque peu complexe. Les services informatiques proposés au laboratoire ont donc trois origines possibles : le service informatique du laboratoire (serveurs de fichiers, sauvegardes, web, transfert de fichiers, authentification centralisée, adressage dynamique, réseau, calculs, etc.), le CRI du campus CNRS (mail, réseau) et le CRI du campus UJF (réseau, wifi, authentification pour le wifi). Les nouveaux services à déployer dans les années à venir (à plus ou moins court terme) sont relatifs aux technologies suivantes : réseaux virtuels privés, sauvegardes déportées, web dynamique, accès authentifiés au réseau, etc. Ces services seront vraisemblablement déployés au sein du laboratoire. S'ils l'étaient au niveau d'une des composantes, ils feraient l'objet d'un travail en partenariat.

Il est cependant fort probable que les aspects stockages resteront implantés au sein du laboratoire, de nouveaux systèmes de stockage seront installés afin de faire face à la demande (technologies SAN ou NAS – en cours d'étude).

Nous aborderons ici les aspects numériques au travers du projet PHYNUM, dont le responsable scientifique est A. Pasturel. Ce projet, comme cela a été rappelé dans l'avant propos, s'inscrit dans le cadre d'un plan état région (CPER qui se termine en 2006). A la fin de l'année 2006, le projet PHYNUM bénéficiera de moyens financiers suffisant pour réaliser une opération de « mise à jour ». Cette opération permettra à la communauté concernée (LPMMC, LEPES actuel, LSP, LTPCM) d'acquérir une nouvelle plateforme qui sera probablement installée dans les locaux du Laboratoire de Spectrométrie Physique. Parallèlement, un nouveau projet PPF, faisant suite à CIMENT, devrait si il est retenu permettre à l'ensemble des projets de poursuivre les actions entreprises. Dans le cas contraire, il sera nécessaire de trouver des moyens financiers pour financer le futur phynum. Soulignons que nous sommes en cours d'étude pour accrocher une partie de la plateforme de calcul aux grilles de calcul CIGRI et EGEE.

III – La formation permanente

Compétences à acquérir dans l'unité :

Les besoins en formation pour l'année 2006 concernent essentiellement les nouveaux arrivants ou les nouvelles fonctionnalités à mettre en place dans le laboratoire. Cette année deux nouveaux arrivants maîtrisent mal le français et souhaitent suivre une formation « Français pour étrangers ». Nous avons par ailleurs répertorié une demande de formation au langage JAVA.

Par ailleurs, notre laboratoire qui avait « délégué » la manipulation de xlab à la délégation jusqu'à présent devra à partir de l'année 2006, acquérir ce logiciel et l'utiliser. Le secrétariat demande donc une formation à son utilisation.

Quelques demandes de formation plus « spontanées » pourraient intervenir au cours de l'année, mais elles devraient se limiter à une ou deux demandes.

Transfert du savoir faire :

Quant au transfert du savoir-faire du laboratoire, il se situe à différents niveaux, suivant des modes d'apprentissages variés :

- tout d'abord à travers les propositions de stages scientifiques au laboratoire, faites chaque année dans le cadre des diverses filières niveau Licence et Master 1 & 2.
- Nous sommes plusieurs à intervenir régulièrement (depuis plusieurs années) en tant qu'enseignant dans des formations spécialisées, comme par exemple des cours de l'Ecole Doctorale, cours Master, ou des Ecoles thématiques nationales ou internationales.

Rappelons que les membres de notre laboratoire sont également très actifs au niveau de l'organisation des écoles thématiques, en France comme à l'étranger.