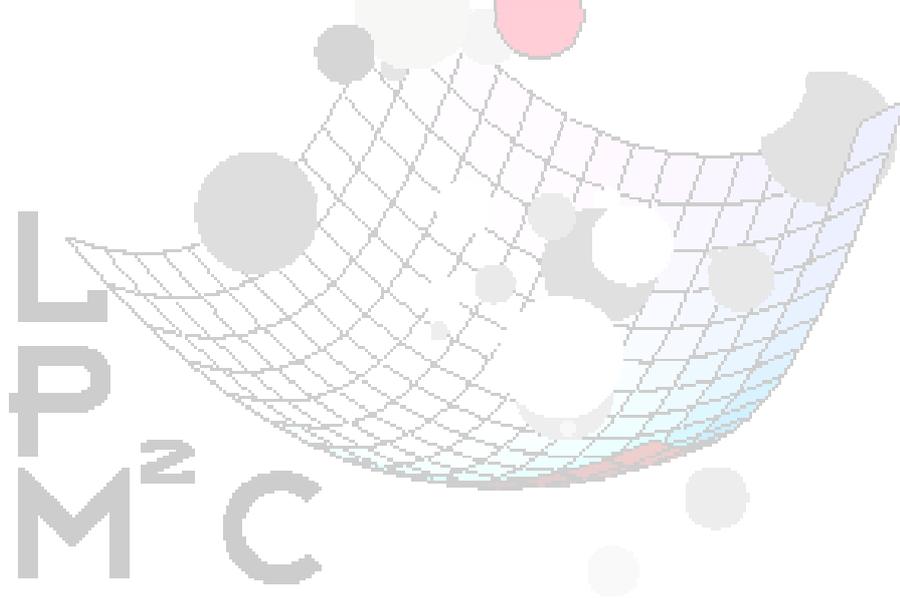


Dossier de contractualisation

2003-2006

Laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés

UMR 5493



SOMMAIRE

II - Dossier scientifique

II.1 Rapport scientifique concis et utilisation des crédits des 4 années précédentes	
Avant propos	13
Rapport scientifique détaillé	19
II.2 Bilan quantitatif sur les quatre dernières années concernant (ce bilan est un élément fondamental de l'évaluation):	
II.2.1 Les publications majeures de niveau international	40
II.2.2 Les communications avec actes	48
II.2.3 Les conférences invitées dans les congrès internationaux	50
II.2.4 Autres publications	54
II.2.5 Les activités internationales.	55
II.2.6 Les contrats de recherche	56
II.2.7 Les brevets licenciés.	
II.2.8 La valorisation (notamment brevets), le partenariat industriel et les créations d'entreprises.	
II.2.9 L'information scientifique et technique et la diffusion de la culture scientifique.	57
II.3- Déclaration de politique scientifique pour la période 2003-2006 et les équipes composant l'unité	
II- 3 – 1 note de synthèse sur les projets scientifiques	58
Détails des projets scientifiques	61
II –3 – 2 liste des équipes internes composant l'unité	75

II - Dossier scientifique

Avant-propos

Le laboratoire de Physique et Modélisation des Milieux Condensés a été fondé en 1991 par Roger Maynard et Alain Pasturel. Il répondait à un besoin de renforcer les approches théoriques et numériques dans un contexte thématique plus large que celui des laboratoires de la matière condensée du polygone scientifique. 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-associée au CNRS en 97-98 et enfin UMR 5493 CNRS-Université Joseph Fourier à partir de 1998. Notons aussi que pas moins de 15 thèses ont été soutenues depuis 1991. Au cours de ces deux dernières années deux faits marquants ont considérablement remodelé le laboratoire.

C'est tout d'abord l'arrivée en Janvier 2000 de Frank Hekking, professeur en 28^{ième} section à l'Université Joseph Fourier, qui a amené avec lui une problématique très importante dénommée « physique théorique des systèmes mésoscopiques ». Cette arrivée correspondait à une demande forte de la communauté grenobloise. Pour notre laboratoire, l'introduction de ce thème de recherche parmi les deux autres thèmes « stabilité des structures complexes » et « ondes en milieux complexes » est un liant qui donne plus de cohérence à notre démarche scientifique. En effet, la présence d'Alain Pasturel, spécialiste des approches numériques ab initio de petits systèmes et celle de Bart van Tiggelen, spécialiste de la propagation des ondes en milieu désordonné, permet d'envisager des projets de recherche communs, croisant les expertises de chacun. Nous verrons dans les perspectives que la thématique « nanosciences » est un projet fédérateur au niveau de tout le laboratoire.

L'autre fait essentiel est l'arrivée de trois chargés de recherche en Octobre 2001, Fabio Pistolesi, CR1 en commission 06, Sergei Skipetrov, CR2 en commission 05 et Olivier Le Bacq, CR2 en commission 19. Si ces trois arrivées représentent d'un point de vue du simple maniement des chiffres une augmentation de 50% de notre effectif, ce qui est en soi une grande satisfaction, nous pensons également que l'intégration de ces jeunes personnalités scientifiques dans les trois grands thèmes du laboratoire se fera sans aucun problème du fait des liens scientifiques déjà existants. Nous avons choisi délibérément d'inclure leur activité scientifique dans le bilan scientifique du laboratoire afin de bien souligner ces liens thématiques.

Ce bilan est présenté plus en détail ci-après (voir rapport scientifique détaillé) 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 une courte introduction qui doit permettre de comprendre l'état d'esprit de nos recherches. Celui-ci correspond toujours à notre première déclaration d'intention, à savoir que nous sommes des théoriciens mais en interaction forte avec des équipes expérimentales, et que nous faisons appel très souvent à des méthodes numériques pour progresser dans la compréhension des systèmes complexes qu'offrent les divers domaines de la physique que nous étudions. A ce sujet, le laboratoire a initié le projet de méso-informatique PHYNUM qui vient d'être financé dans le cadre d'un contrat plan état région et qui devrait se matérialiser fin 2002, sous la direction technique de Françoise Berthoud, l'ingénieur informaticien du laboratoire.

Aujourd'hui, avec plus de 9 chercheurs et enseignants-chercheurs permanents, le laboratoire devient une unité de taille respectable et qui nécessite d'autres moyens financiers que ceux qu'elle a connus jusque là. Au cours de ces dernières années, les dotations récurrentes du CNRS et de l'Université nous ont permis de couvrir les frais de fonctionnement et de petit matériel, mais absolument pas le renouvellement des serveurs de calcul qui constituent notre outil de travail. Il apparaît essentiel pour le prochain contrat quadriennal que nous puissions renouveler ces serveurs de calcul grâce à des opérations de crédit mi-lourd.

Nos perspectives de recherche sont à plusieurs niveaux. Elles concernent tout d'abord les projets qui vont être développés respectivement au sein des trois équipes, mais aussi un projet fédérateur autour des nanosciences qui sera animé par Frank Hekking. Dans la partie Grands Thèmes et Projets nous présentons succinctement les projets de recherche des 3 équipes, que l'on retrouve de manière plus détaillée dans la partie projet scientifique.

Le renforcement du laboratoire au cours de ces deux dernières années ainsi que nos spécificités (relations très étroites avec le monde expérimental, interdisciplinarité, et usage quasi-systématique des méthodes numériques) nous ont conduits à réfléchir sur notre rôle dans le développement de la physique théorique à Grenoble. Nous proposons quelques éléments de réflexion ci-après.

Enfin, le laboratoire participera pleinement à l'animation scientifique (cours, séminaires) qui va se développer autour du projet PHYNUM.

Grands Thèmes et Projets

Les savoir-faire capitalisés au sein du laboratoire sont les suivants :

Mésoscopie :

Aujourd'hui on sait que la description classique du transport ne peut pas être appliquée aux métaux de dimensions réduites à basse température. En effet, dans ces métaux mésoscopiques, les électrons se propagent de façon cohérente 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 dépend crucialement du système en question. Nos activités de recherche sur le transport et le bruit thermoélectrique concernent les fils quantiques ainsi que les métaux désordonnés. Le but de cette recherche est de montrer comment les effets conjugués du désordre et des interactions se manifestent dans les coefficients de transport mesurables tels que la conductivité électrique ou thermique, ou encore le spectre du bruit.

Le comportement d'un métal mésoscopique supraconducteur peut être très différent du comportement d'un supraconducteur infini de type *bulk*. Nous étudions les propriétés thermodynamiques et de transport d'un petit grain supraconducteur. Nous nous intéressons également à la force d'appariement dans un nanograin supraconducteur. On s'attend à ce que la description habituelle du couplage électron-phonon change puisque la taille finie d'un petit grain mène à la quantification du spectre des électrons et des phonons. En outre, les effets de surface ne sont plus négligeables.

Finalement, on s'intéresse aux 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. On a pu mettre en évidence les états enchevêtrés dans un circuit comportant un bit quantique Josephson couplé à un résonateur supraconducteur.

Méthodes ab initio:

C'est une approche qui, à partir d'une description quantique des électrons et des hypothèses variationnelles comme la densité fonctionnelle, permet d'obtenir les propriétés de base de la matière condensée, telles que les structures électroniques, les énergies chimiques et mécaniques. L'efficacité de cette méthode vient d'être reconnue par la communauté scientifique par l'attribution du prix Nobel de Chimie à Walter Kohn. La partie algorithmique consistera à mettre au point des méthodes de calcul « d'ordre N » permettant d'aborder l'étude de systèmes de taille de quelques centaines d'atomes. Un effort doit être fait aussi dans le traitement des corrélations. Quant aux matériaux, il est envisagé d'étudier la croissance CVD (Chemical Vapor Deposition) de Si et SiC, la structure de liquides surfondus ainsi que les contraintes mécaniques dans les films épitaxiés. La problématique du transport aux interfaces hétérogènes sera également abordée.

Ondes en milieu complexe :

Ces dernières années, un renouveau des concepts de base de la diffusion multiple des ondes, aussi bien électromagnétiques qu'ultrasonores ou sismiques, a été initié et développé au laboratoire avec un esprit très interdisciplinaire: il s'agit de l'étude du transfert radiatif dans des systèmes hétérogènes et mésoscopiques, combinant le désordre de la répartition des diffuseurs avec l'anisotropie, la rotation de Faraday et éventuellement les non-linéarités. Au-delà des valeurs moyennes des champs ou des intensités diffuses, les corrélations de courte et de longue portée ont été calculées en fonction du champ magnétique pour les milieux magnéto-optiques, de la fréquence des ondes, des non-linéarités. Les projets concernent les capacités à transférer l'information par des ondes dans ces systèmes fortement diffusants, les instabilités provenant des non-linéarités, la localisation forte en régime dynamique, la magnéto-chiralité des milieux désordonnés et tout un ensemble d'études du comportement diffus des ondes sismiques en régime « mésoscopique ».

Un thème fédérateur : Les Nanosciences

En amont de toutes les applications ou nanotechnologies, les nanosciences concernent l'ensemble des recherches sur les propriétés originales d'objets de petite taille. Ces recherches ont connues dernières années un grand essor, directement connecté à l'effort industriel de la miniaturisation des composants élémentaires de l'électronique, l'un des défis majeurs étant le développement de circuits intégrés plus petits et plus performants. Les nanosciences permettent d'envisager une explosion d'applications nouvelles, notamment dans les technologies de l'information et de la communication, où la réduction de la taille des composants (à des dimensions submicroniques) aboutit déjà à des phénomènes nouveaux (effets quantiques, blocage de Coulomb).

On peut aussi s'attendre à voir apparaître des instruments et des applications reposant sur des principes radicalement nouveaux dans des disciplines telles que la chimie, la physique et l'informatique. A l'aide de nouvelles techniques comme la microscopie à champ proche, les nanosciences d'aujourd'hui permettent de plus en plus une approche du type "bottom up", c'est-à-dire une approche basée sur l'assemblage des nano-objets individuels (des atomes ou des molécules) pour en former des nano-composants dotés de certaines propriétés spécifiques (fil quantique semiconducteur, nanocircuit supraconducteur, puits quantique magnétique). Il est évident qu'une telle approche nous mène à de nouvelles questions au niveau de la théorie et de la modélisation. Au cœur de la théorie quantique résident les principes très sophistiqués de la mesure de la cohérence. Il est fort possible que grâce aux expériences nouvelles en nanosciences,

de nouveaux défis théoriques apparaissent sur le comportement cohérent de plusieurs particules, l'enchevêtrement de leurs fonctions d'onde et leur décohérence.

Aujourd'hui, plusieurs laboratoires grenoblois ont une activité scientifique importante dans le domaine des nanosciences, notamment au niveau expérimental. 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 nouvelles technologies comme l'électronique moléculaire (nanotubes de carbone), les structures hybrides (jonction métal-matériau ferromagnétique), ou encore l'information quantique (systèmes photoniques, nanocircuits supraconducteurs). Etant donné cette activité expérimentale importante, il est fort souhaitable que la recherche théorique dans ce domaine se développe en parallèle au sein du LPMMC.

Etant donné le savoir-faire spécifique des trois équipes de notre laboratoire, le LPMMC est tout à fait apte à aborder des questions pertinentes dans le domaine des nanosciences. Par exemple des questions se posent au niveau de la chimie (Pasturel, Peyla) au sujet des lois qui régissent les processus de positionnement d'un objet individuel sur une surface à l'échelle nanométrique ainsi que l'assemblage de plusieurs nano-objets (interactions, dynamique) afin d'en former un nano-composant. Pour que ce composant ait une fonctionnalité prérequis, il faut comprendre comment l'information (le plus souvent d'origine électronique ou photonique) est transférée entre les nano-objets constituant le composant. Il faut alors non seulement comprendre les propriétés physiques de transport (Hekking, van Tiggelen), mais aussi connaître la relation entre les propriétés de transport et la capacité à transmettre l'information (Maynard, Skipetrov).

La Physique Théorique à Grenoble : le rôle du LPMMC

Grenoble est un centre de recherche important en physique de la matière condensée et ses interfaces avec la chimie, la biologie et les géosciences. L'approche théorique et numérique y est indispensable pour stimuler les réflexions prospectives et interdisciplinaires dans un environnement très majoritaire d'expérimentateurs. En effet les théoriciens et numériciens doivent analyser les mesures, mais aussi prédire des comportements nouveaux et encourager les transferts conceptuels dans des champs disciplinaires connexes. C'est probablement la tâche principale à mener dans les prochaines années sur les thèmes très actuels des nanosciences et des interfaces disciplinaires. Quelle est la bonne proportion de théoriciens dans une communauté de physiciens? Il est difficile de répondre à cette question si ce n'est que cette proportion a toujours été très faible à Grenoble. Si l'existence d'un groupe de théoriciens à l'ILL et à l'ESRF, pour la plupart non permanents, a joué un rôle important d'animation, la création et la consolidation du LPMMC a été la première tentative de stabiliser un groupe de théoriciens dans une unité pérenne.

Les laboratoires de physique théorique de trop grande taille – effectif supérieur à 15 – ont de grandes difficultés à maintenir une interaction forte avec les pratiques expérimentales. On y observe fréquemment une tendance à la formalisation qui freine les synergies nécessaires aux avancées dans les problématiques actuelles. Nous pensons que la taille actuelle du LPMMC est proche d'une taille optimale pour mener sa mission et nous ne souhaitons pas regrouper l'ensemble des théoriciens grenoblois qui développent leur recherche en petite équipe au sein des autres laboratoires grenoblois. Au contraire 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. En particulier nous soutenons le projet de création d'un espace pour accueillir des visiteurs au cœur du polygone scientifique. Le LPMMC étant fortement cosmopolite, nous nous sentons une vocation particulière pour cet accueil comme « local contact » de la théorie.

Du fait de ses recrutements récents (+3 CR en 2001), le laboratoire rencontre une difficulté dans son implantation à la Maison des Magistères. Les locaux actuels (300 m2) sont trop exigus pour les 10 permanents avec leur cortège de doctorants, de postdocs et de stagiaires. La surface optimale pour ce petit laboratoire serait plutôt de 400 m2. Si l'accueil des visiteurs devait se faire dans 100 m2 environ, à proximité du LPMMC, c'est une surface totale de 500 m2 qu'il faudrait prévoir pour une réimplantation du LPMMC. Cette implantation doit se réaliser sur le site du polygone CNRS, immergée au cœur des laboratoires de la matière condensée. Nous souhaitons que cette proposition soit évoquée à la Direction du CNRS, avant l'attribution des nouvelles surfaces construites dans le cadre de la surélévation du bâtiment abritant le LEMD.

Aspects numériques

La politique informatique au LPMMC s'articule principalement autour de deux types d'activités :

- la production scientifique de notre laboratoire s'appuie en grande partie sur les simulations numériques et/ou du calcul et nécessite donc des moyens de calcul (ressources matérielle, logiciels et d'expertise) qui vont en s'accroissant.
- les outils bureautiques, les outils de communication, un réseau performant et de qualité, une gestion solide et sûre de l'outil informatique sont des éléments clefs pour une efficacité optimale du travail du chercheur.

La recherche d'un compromis entre des besoins de performances et les coûts financiers et humains nous a conduits à adopter une politique informatique « centralisée », à l'échelle du laboratoire, où quelques serveurs de services et de fichiers fournissent aux utilisateurs des services adéquats, une sécurité optimale, un service continu, une sauvegarde des données. Il y a quatre ans, ces serveurs étaient tous des IBM type RS6000; nous les avons fait évoluer et actuellement la moitié des ces serveurs sont des PC sous Linux. Les postes de travail sont quant à eux des PCs sous Windows ou Linux ou des Terminaux X. Nous adaptons le poste de travail aux besoins spécifiques de chaque chercheur.

Le cœur de notre réseau est constitué d'un routeur, de commutateurs 10/100.

Le CNRS (COMI et département SPM) a récemment accordé une subvention à l'ensemble des laboratoires du polygone du CNRS pour leur permettre de faire évoluer leur réseau (tant du point de vue du débit que de la qualité de service et de la sécurité informatique). Le cœur de notre réseau doit donc très prochainement (2002) évoluer vers un réseau haut débit (1000), avec routeur et commutateurs.

Pour ce qui concerne nos besoins en calcul numérique, nous y avons répondu de plusieurs manières :

- en améliorant notre accès aux grands centres de calcul nationaux (essentiellement l'IDRIS)
- en maintenant et en faisant évoluer une machine de calcul locale (Serveur IBM, RS6000 biprocesseurs). Nous avons d'ailleurs récemment demandé une subvention au département SPM afin d'augmenter cette puissance de calcul locale.
- en s'impliquant très largement dans un projet de déploiement « méso-informatique » PHYNUM, dans le cadre d'un contrat plan-état-région. En effet Alain Pasturel et Françoise Berthoud sont respectivement responsable scientifique et technique de cette plate-forme de calcul pour laquelle une subvention de 1,5 MF a été accordée pour l'année 2002. Ce projet s'inscrit dans le cadre de « CIMENT » et concerne plusieurs laboratoires grenoblois dépendant du département SPM (LEPES, CRTBT, laboratoire de spectrométrie, DRFMC, LPMMC).

Durant ce dernier quadriennal, nous aurons investi environ 360 kF(HT) de notre dotation de base et 100 kF(HT) de contrats en matériel informatique.

Les perspectives en informatique correspondent d'une part à l'évolution des besoins cités précédemment (du fait de l'évolution des matériels et du fait de l'augmentation de nos effectifs) et d'autre part à l'émergence de nouveaux besoins :

Consolidation des ressources de base en informatique :

Tout d'abord, il nous apparaît nécessaire de prévenir les besoins croissants en terme de taille de fichiers (grosses quantités de données intermédiaires dans les simulations numériques), mais aussi volume croissant de données à sauvegarder. Pour cela, nous envisageons :

- l'achat d'une baie de disques raid pour un volume total d'environ 1 To (demande de subvention adressée au département SPM fin 2001)
- l'achat d'un système de sauvegarde type DLT haute performance (environ 60 kF)

L'évolution de nos serveurs de service de communication, bureautique, imprimantes, etc... est une nécessité qui correspond à un budget annuel d'environ 40 kF.

La maintenance et mise à jour d'un parc de postes de travail (environ 20 postes de travail) correspond à un budget annuel d'environ 30 kF.

Projet PHYNUM

Au cours du prochain quadriennal, la plate-forme PHYNUM sera en exploitation. Nous offrirons un accès interactif à l'ensemble des partenaires de ce projet en favorisant l'émergence de projets nouveaux. Par ailleurs, nous organiserons des formations au calcul numérique : optimisation, calcul réparti, etc...

Nous souhaitons favoriser le partage d'expériences scientifiques et techniques par l'organisation de rencontres informelles entre les utilisateurs des différents laboratoires Grenoblois concernés (CRTBT, LEPES, LPMMC, DRFMC, LSP, ..).

Rappelons que cette plate-forme (accessible à plusieurs laboratoires du département SPM) sera administrée (au sens informatique) par Françoise Berthoud (IE rattaché au LPMMC) à hauteur de 2 journées par semaine.

Calculs Numériques

A partir de 2003, nous effectuerons nos calculs en partie sur la plateforme PHYNUM, en partie à l'IDRIS, en partie localement.

Il nous paraît en effet essentiel de maintenir une puissance de calcul locale (en particulier pour les tests préliminaires, les calculs interactifs, le calcul formel, les besoins en graphisme). Pour cela, nous envisageons d'acheter un serveur type PC sous Linux dédié aux calculs formels (mathematica) et à moyen terme, en 2004 ou 2005, nous envisageons de renouveler notre serveur de calcul principal en fonction des disponibilités futures (serveur à mémoire partagée ou cluster de PCs) pour un budget qui pourrait être estimé aujourd'hui à environ 400 kF.

Locaux :

Enfin, pour répondre à un besoin d'extension des locaux du LPMMC, mais aussi à la nécessité de sécurité informatique, nous souhaitons rapidement déménager nos serveurs communs (qui se trouvent actuellement dans une salle d'environ 30 m²) vers une salle plus petite qui ne possède pas de fenêtres. Ce déménagement implique des frais liés à l'installation d'une climatisation, d'un onduleur, au câblage électrique et au câblage informatique pour un montant global qu'on peut grossièrement estimer à 150 kF, cette somme comprenant l'aménagement du local libéré en bureaux paysagers pour l'accueil de chercheurs et stagiaires.

II.1 Rapport scientifique détaillé

A. Equipe : *Auto-organisation des structures complexes*
Responsable : Alain PASTUREL

<u>Permanents:</u> <u>Alain PASTUREL</u> (CNRS) Olivier LEBACQ (CNRS) Philippe PEYLA (UJF)	<u>Thèse:</u> Johan BOUCHET Andrei INCZE Gérald JOMARD Cécile BERNE
---	--

6 directions de thèse (directeur de thèse : Alain PASTUREL)

Le point particulier est que 3 étudiants ont soutenu leur thèse entre Juillet et Octobre 2000.

- *étude des défauts dans les métaux de transition* : O. Lebacq (Janvier 1999)
- *approche ab initio de processus d'oxydation du zircalloy-4* : G. Jomard (Juillet 2000)
- *étude théorique des alliages Pu-Al* : J. Bouchet (Octobre 2000)
- *Solidification hors d'équilibre et transformations de phases* : C. Berne (Octobre 2000)
- *Interactions Oxygène –Graphènes* : A. Incze (soutenance Septembre 2002)
- *Diagramme de phases du système Pu-Al et corrélations* : G. Robert (soutenance Septembre 2003)

Depuis Mai 2001 et pour une année Philippe PEYLA est:

- à 50% au LPM2C (CNRS-UJF)
- à 50 % au LSP (Laboratoire de Spectrométrie Physique de Grenoble, CNRS-UJF)

Cours et enseignement (Ecoles et GDR):

- ❑ *Calculs ab initio des énergies de contraintes epitaxiales.* (A. Pasturel)
Ecole GDR Relax, Autrans Mars 1999
- ❑ *Les Méthodes de Minimisation en Chimie Quantique,* (A. Pasturel et L. Magaud)
Ecole Galerne, Piriac Septembre 1999.
- ❑ *Stabilité de films épitaxiés : contraintes et effets d'alliage.*(A. Pasturel)
GDR Relax , Marseille Novembre 1999.
- ❑ *Approche ab initio des phénomènes de contraintes en surface et aux interfaces* (A. Pasturel)
Ecole SIR 2000, Porquerolles , Octobre 2000.
- ❑ *Les premiers principes appliqués aux calculs de diagrammes de phases*
(C.Colinet et A. Pasturel),
Ecole d'été de calculs thermodynamiques, La Grande Motte (Septembre 2000).
- ❑ *Introduction aux calculs de structure électronique* (T. Deutsch et A. Pasturel)
Ecole SEMAT 2000, Autrans, Octobre 2000
- ❑ *Etude de la surface et des interactions gaz-surface par calculs ab initio*
(L. Magaud et A. Pasturel), Ecole IGS 2001, Autrans Janvier 2001.
- ❑ *Stabilité mécanique et contraintes dans les films minces,* (A. Pasturel)
Ecole « Spectroscopie Raman en Chimie et Physique des Matériaux »
Les Houches, Mars 2002

Les activités de recherche développées dans ce thème sont du domaine de la physique du solide. On peut les regrouper autour de grands axes comme stabilité et transition de phases, réactivité de surface et croissance, ou bien relation structure/propriétés. Parmi toutes les études proposées ci-après, nous pouvons mettre en lumière celles qui traitent des assemblages hétérogènes pour lesquels la nature de l'interface joue un rôle primordial. Ce rôle peut être appréhendé à l'échelle nanoscopique par une analyse de la liaison chimique comme dans les études sur la réactivité de surface. Elle peut être aussi comprise aux échelles méso-macroscopiques par l'analyse des contraintes mécaniques dans les couches épitaxiées. Enfin, l'étude de l'anisotropie magnéto cristalline dans les multicouches métalliques est un bel exemple de l'influence de l'interface dans la relation structure/propriétés.

1. Influence des défauts sur les propriétés structurales et thermodynamiques (Alain Pasturel)

Le comportement macroscopique d'un matériau résulte le plus souvent de la présence de défauts dans sa structure : par exemple, les défauts ponctuels (lacunes, interstitiels, boucles lacunaires) jouent un rôle primordial dans les phénomènes de diffusion et de vieillissement. Les défauts linéaires (dislocations) contrôlent la plasticité. Les défauts étendus (surfaces, joints de grain, parois d'antiphase, interfaces) générés lors de la synthèse du matériau, pilotent le comportement sous catalyse et interviennent dans les phénomènes de corrosion ... de ce fait, le comportement du matériau, placé dans son milieu de fonctionnement, ne peut être déduit simplement de théories préexistantes. On peut cependant tenter d'induire les comportements à partir de modélisation ou de lois d'évolution à l'échelle atomique dont les caractéristiques reposent là encore sur des modèles énergétiques.

Les défauts ponctuels dans les composés d'intérêt pour l'industrie nucléaire comme les composés UO_2 et ZrO_2 ont été largement étudiés à l'aide de méthodes semi-empiriques. Les limitations de ces méthodes sont maintenant bien connues et nous avons proposé pour la première fois d'appliquer une approche ab initio. Pour le composé UO_2 , nous avons déterminé les énergies de formation des lacunes d'oxygène et d'uranium, des interstitiels d'oxygène et d'uranium, des paires de Frenkel et des défauts de Schottky. Le résultat principal est que le composé UO_2 s'oxyde spontanément en présence d'oxygène puisque l'énergie de formation du défaut interstitiel d'oxygène est négative. De même les défauts majoritaires sont des défauts apparaissant dans le sous-réseau oxygène et il n'y a pas déformation de la matrice. Ceci est en très bon accord avec un certain nombre d'informations expérimentales et nous a engagé à continuer par l'étude de la solubilité des produits de fission (comme la solubilité du Krypton) dans ce composé. Pour le composé ZrO_2 , nous nous sommes attachés à étudier la stabilité relative des polymorphes en présence de défauts, de type lacune d'oxygène. Nous avons obtenu que l'énergie de formation de la lacune d'oxygène dans les phases haute température (cubique et quadratique) est beaucoup plus faible que dans la phase monoclinique de l'état fondamental. Ceci met en évidence le rôle des lacunes au cours de ces transformations. De même, la présence d'impuretés de fer dans la matrice ZrO_2 favorise la formation de lacunes d'oxygène dans les phases cubique et quadratique. En particulier les concentrations limites obtenues à partir d'un modèle thermodynamique de défauts sont du même ordre de grandeur que les données expérimentales recueillies dans la littérature. Elles sont notamment voisines des mesures réalisées sur des couches d'oxyde formées sur Zircaloy-4 en autoclave ou en réacteur.

Le rôle des défauts dans les matériaux pour l'industrie électronique est aussi considéré comme essentiel. Pour notre part, nous avons étudié récemment les défauts dans le silicium et dans différents polymorphes de la silice (quartz, cristobalite et stishovite). Si les énergies de formation des lacunes d'oxygène non relaxées sont remarquablement constantes dans les trois structures, les phénomènes de relaxation sont eux par contre très différents. Ceux-ci conduisent à la formation d'une liaison Si-Si forte dans la structure quartz, à une liaison Si-Si faible dans la structure cristobalite alors qu'aucune liaison Si-Si n'est obtenue dans la stishovite. Nous avons aussi mis en évidence la possibilité d'obtenir de lacunes de silicium en atmosphère oxydante avec même la formation de ponts péroxyl dans la structure quartz.

Le rôle des parois d'antiphase dans les composés intermétalliques est essentiel pour comprendre la structure cristallographique d'un certain nombre d'entre eux ainsi qu'une partie de leurs propriétés mécaniques. Il peut même conduire à l'apparition de phases à longue période. Ces structures peuvent être vues comme étant créées par une modulation unidimensionnelle qui module l'occupation des sites d'un réseau (ici cfc) par une espèce chimique dans les plans atomiques perpendiculaires à l'axe de la modulation. Pour aborder la compréhension de la stabilité de ces phases à longue période, nous avons utilisé un modèle d'ANNNI (axial-next-nearest-neighbor Ising) généralisé pour lequel le nombre et les valeurs énergétiques des interactions ont été déterminés par des calculs ab initio. Nous avons appliqué cette approche au système Cu-Pd et aux systèmes (Ti, Zr, Hf)-Al. Pour le système Cu-Pd, nous avons bien trouvé des phases à longue période comme états de base, conforme à la compréhension expérimentale. Pour le système Ti-Al, seules des études haute température existent avec la mise en évidence d'un « escalier du diable » ; Pour notre part, nous ne trouvons pas de phases à longue période comme états de base.

2. Réactivité de surfaces (Alain Pasturel)

Ce thème recouvre la détermination d'échange d'énergie, l'analyse des réactions induites par transitions électroniques ou par manipulations d'atomes et de molécules à la surface d'un matériau. A travers ce thème, je me propose d'appréhender la dynamique réactionnelle, c'est-à-dire la description de la formation ou de la rupture de la liaison chimique. Deux directions sont privilégiées : la croissance des couches minces par MBE et CVD et l'oxydation de surfaces métalliques et de surfaces de graphènes.

Croissance des couches minces :

Si l'utilisation des méthodes ab initio pour traiter les surfaces devient « relativement » courante, il n'en est pas de même pour tout ce qui concerne les problèmes associés à la croissance car il s'agit de phénomènes complexes et de grande taille. Dans le cadre de la modélisation de la croissance de SiC (polytype 4H) l'approche ab initio est utilisée pour décrire l'accrochage des molécules gazeuses sur une surface puis pour déterminer les chemins d'activation qui permettent aux espèces absorbées de diffuser en surface. Une des particularités de SiC est d'exister sous forme de nombreux polytypes. La nature du polytype, définie par la séquence d'empilement des plans (cubique ou hexagonale) dépend fortement des conditions de croissance. Le polytype 4H a été choisi car il a des propriétés électroniques les plus intéressantes. Après avoir calculé les énergies de formation de surface en fonction de la polarité (terminaison Si ou C) et de la distance surface-faute d'empilement, nous nous intéressons à la morphologie des marches, à l'énergie que coûte le dépôt d'un biplan en fonction de la nature de la surface afin de mieux comprendre les différents modes de croissance observés expérimentalement : croissance par avancée de marche, regroupement de marche, conservation ou non du polytype. Cette approche qui est en cours de finalisation constitue la première partie du traitement de la croissance de SiC. Pour la suite, il s'agit de modéliser des défauts isolés ou des distributions de marches. Il est alors indispensable d'avoir un programme de calcul d'énergie totale d'ordre N (nous reviendrons sur ce sujet dans la partie Objectifs).

Oxydation de surfaces métalliques :

Une autre question d'importance dans l'industrie nucléaire est l'oxydation puis la corrosion des gaines de zircalloy-4. Pour tenter de donner des premières réponses, nous avons choisi d'aborder cette étude par la modélisation des premiers stades de l'oxydation de la surface (0001) du zirconium puisque le zircalloy-4 est constitué à plus de 98% de zirconium. Notre approche théorique nous a permis de mettre en évidence les étapes initiales de l'oxydation, d'une part la chimisorption dissociative des molécules O₂ et d'autre part la diffusion des adsorbats (atomes d'oxygène) dans le volume même à faible température. Nous avons aussi montré que pour une température fictive de 0 K, les atomes d'oxygène doivent franchir une barrière énergétique de 3.5 eV pour traverser la surface. La comparaison de cette barrière de diffusion et de l'énergie de dissociation calculée pour la molécule d'oxygène (6.05 eV) nous a conduit à supposer que la dissociation puisse fournir suffisamment d'énergie à l'un des deux atomes pour lui permettre de franchir le plan de surface. Nous avons finalement montré la faisabilité d'un tel processus, ce qui constitue la première étude ab initio de la dissociation de la molécule d'oxygène sur la surface (0001) du

zirconium. Ainsi on peut conclure qu'il existe une configuration initiale de la molécule d'oxygène qui conduit à une absorption d'un des deux atomes de la molécule directement sous la surface du zirconium, conformément aux observations expérimentales.

Oxydation de surface de graphènes :

Cette étude se développe au sein du CPR « Friction des composites carbone-carbone » et a pour but de mieux comprendre le vieillissement des surfaces de graphène par oxydation. Elle comporte deux grandes étapes :

La description des énergies de liaison (ou stabilité) entre l'oxygène et les graphènes. Une première série de calculs ab initio a permis de mieux comprendre la réactivité des surfaces de graphènes vis à vis de l'oxygène. On a pu ainsi déterminer quels sont les sites réactifs pour les différentes structures choisies. Ce sont les surfaces prismatiques de type zig-zag qui montrent la plus forte réactivité. A noter aussi que nos résultats sont très semblables à ceux obtenus pour les « lèvres de nanotube » montrant ainsi que les effets de courbure de la feuille de graphite sont négligeables vis à vis de la réactivité gazeuse. Nous avons aussi abordé la détermination du travail d'adhésion mécanique entre deux surfaces propres ou contaminées par l'atmosphère gazeuse. Ceci constitue une étape importante dans la compréhension de la relation nature de la liaison chimique/adhésion. On peut penser que plus l'adhésion mécanique sera forte, et plus l'usure du matériau sera grande, cette usure se produisant par arrachage et création de débris.

La description des mécanismes cinétiques qui gèrent la destruction/ recombinaison de la surface oxydée ou des débris a été également abordée. Nous avons montré que le (ou les) étapes limitantes de l'interaction O-composites était la formation de CO. La quantification des énergies – donc l'étude thermodynamique – doit permettre d'établir un bilan énergétique plus pertinent et son association aux mécanismes cinétiques une meilleure appréhension du rôle futur des dopants.

3. Phénomènes d'alliages : phases d'équilibre et métastabilité (Alain PASTUREL).

La compréhension fondamentale de l'apparition de phases dans un système donné est un thème récurrent de mes recherches. Durant ces dernières années, j'ai abordé les problèmes de stabilité de phases dans les alliages basés sur les métaux réfractaires et les alliages de type Plutonium-Aluminium ou Indium.

Métastabilité :

Depuis quelques années, nous avons développé une approche ab initio pour appréhender les phénomènes de métastabilité à la tour à chute libre de Grenoble. La tour à chute libre de Grenoble est une technique d'obtention de la surfusion pour de faibles vitesses de refroidissement. Si l'amorphisation est rarement accessible par comparaison avec les méthodes de trempe, cette technique permet par contre l'étude des stades initiaux de la solidification et l'obtention de phases métastables ou dites alternatives. L'idée de base est de considérer que le liquide surfondu développe un ordre icosaédrique et que le mécanisme d'apparition des phases alternatives repose essentiellement sur la proximité des symétries locales de ces phases avec la structure du liquide surfondu dont elles sont issues. Parmi toutes les phases existantes pour les systèmes métalliques, les phases de Frank et Kasper sont connues pour présenter un ordre icosaédrique à courte distance et nous avons utilisé ces phases comme base d'interprétation des phénomènes de métastabilité dans les alliages de métaux réfractaires. Nous avons considéré les phases de Frank et Kasper les plus courantes, à savoir les phases A15, sigma et ki. Ces structures présentent à elles trois les différents polyèdres de coordination permettant de décrire toutes les phases de Frank et Kasper. Pour les métaux de transition purs nous avons étudié la stabilité de ces trois phases en compétition avec les phases connues, cubique centrée (cc), cubique à face centrée (cfc) et hexagonale compacte (hcp). Nos résultats révèlent aussi une séquence de stabilité relative qui dépend de la concentration électronique. Cette séquence $cc \rightarrow A15 \rightarrow \sigma \rightarrow ki \rightarrow cfc \rightarrow hcp$ apparaît pour chaque élément considéré et a la particularité de s'inverser au niveau de Mo et Tc dans la série 4d, et au niveau du W et Re dans la série 5d. Ce résultat nous permet de penser que ces phases sont des phases de type Hume-Rothery (une structure de type Hume-Rothery est une structure stable pour une valeur constante de la concentration

électronique) et de comprendre l'apparition des phases dans les systèmes d'alliages de ces mêmes métaux. Par exemple si une phase α existe, à une composition donnée dans un alliage, alors un changement de composition qui correspond à une diminution de la concentration électronique peut potentiellement conduire aux structures σ , A15 ou à la solution solide cc. Réciproquement, si la concentration électronique de cet alliage augmente, alors ce sont les solutions solides cfc et hcp qui sont susceptibles d'apparaître. Ce phénomène se vérifie dans tous les systèmes binaires de métaux réfractaires.

Les alliages à base de Plutonium :

La phase α (cfc) du plutonium est stable de 320°C à 463°C. Une légère addition d'Al, Ga, In ou Tl, stabilise cette phase à température ambiante. La solubilité maximale de ces éléments dans la phase α va de 3.5 at % pour In à 13.6 % pour Al. Cette stabilité a été étudiée par la méthode d'inversion, largement développée par nous-mêmes les années précédentes et qui permet de calculer l'énergie de n'importe quelle configuration atomique à partir de la connaissance d'une dizaine de configurations atomiques. Les effets entropiques sont introduits par une méthode de champ moyen de type méthode variationnelle en amas. Une première série de calculs basés sur l'approximation locale de la densité fonctionnelle (LDA) sous-estime fortement les effets d'alliage dans ces systèmes conduisant même à des énergies de formation positives dans le système Pu-In en contradiction totale avec l'expérience. Ces résultats sont en fait loin d'être surprenants car nous avons montré que l'approximation LDA couramment utilisée dans les calculs ab initio est incapable de décrire le Plutonium pur dans la phase α , les fortes corrélations entre les électrons de type f n'étant pas prises en compte par cette approximation. Nous avons montré que pour cette phase, il est nécessaire de corriger le potentiel LDA par un potentiel de type Hubbard (LDA+U), ceci permettant de tenir compte via un paramètre de Coulomb U des répulsions entre les électrons de la couche 5f du Plutonium. Nous avons étendu cette approche aux alliages de Plutonium et nous avons obtenu alors des résultats en complet accord avec les résultats expérimentaux, notamment une solubilité maximale de 14 at % pour l'aluminium.

4 Croissance par épitaxie par jets moléculaires avec désorption (Philippe PEYLA)

La croissance par épitaxie par jets moléculaires (EJM) est une méthode de croissance cristalline à basse température. Ce procédé d'élaboration permet donc l'obtention de couches très fines (quelques monocouches atomiques) avec des interfaces très abruptes (de l'ordre de la maille atomique) et quasiment dépourvues de défauts structuraux ou chimiques. Depuis maintenant sept ans nous avons développé un code de type Monte Carlo Cinétique qui permet de simuler le dépôt de plusieurs couches atomiques par EJM.

Les bons résultats que nous avons obtenus dans les années précédentes grâce à ces simulations Monte Carlo nous ont encouragés à aller plus loin et à valider nos résultats avec des expériences sur un matériau particulier.

Comme la température d'épitaxie par jet moléculaire est basse, on néglige souvent la ré-évaporation des atomes qui arrivent sur la surface. Pour toute une classe de matériaux semi-conducteurs cela est faux (GaAs, CdTe, GaN) et dans ce cas, la vitesse de croissance devient inférieure ou égale au flux d'atomes incidents. Nous avons donc étudié théoriquement la vitesse de croissance du matériau semi-conducteur CdTe en présence de ré-évaporation et en fonction du flux de matière et de la température du substrat. Nous avons confronté notre modèle à l'expérience. Pour cela nous avons établi une collaboration avec le théoricien Alberto Pimpinelli du LASMEA (CNRS) à Clermont Ferrand et des expérimentateurs Joël Cibert et Serge Tatarenko du Laboratoire de Spectrométrie Physique (UJF-CNRS) et du DRFMC (CEA-Grenoble). Le très bon accord obtenu entre théorie et expérience nous a permis d'obtenir les énergies d'activation de certains processus microscopiques (diffusion d'atomes Cd et Te par paires et désorption d'atomes de Te).

5 Contraintes mécaniques dans les couches épitaxiées (Philippe PEYLA)

Depuis plusieurs années nous nous intéressons aux problèmes liés à modélisation de la croissance cristalline et notamment à la croissance de couches minces par épitaxie par jet moléculaire (EJM). La croissance de ces couches est fortement influencée par la présence de contraintes mécaniques dues à la différence de paramètre de maille entre les différents matériaux utilisés. Les atomes et les îlots déposés sur la surface, déforment le substrat sous-jacent. Ils interagissent à longue portée via cette déformation. Ce phénomène semble être l'un des moteurs de l'auto-organisation des îlots sur la surface (ce type d'auto-organisation est fréquemment rencontré dans les systèmes du type Si/Ge par exemple).

En collaboration avec Chaouqi Misbah (CNRS) du Laboratoire de Spectrométrie Physique de Grenoble (UJF - CNRS), nous avons étudié les interactions élastiques entre atomes déposés sur une surface en cours de croissance. Les atomes sont considérés comme des défauts exerçant des forces sur les atomes voisins situés sur le substrat. Nous avons montré dans le cadre de la théorie continue de l'élasticité que sur un substrat bi-dimensionnel (film mince) l'interaction à longue portée pouvait être attractive ou répulsive selon la géométrie du système.

En collaboration avec H. Muller-Krumbhaar (Forshungszentrum Julich, Allemagne), nous avons également élaboré un modèle 2D de diffusion limitée par agrégation (DLA), en présence d'interactions élastiques répulsives. Nous avons notamment mis en évidence que la dimension fractale de l'agrégat est modifiée en dessous d'un certain rayon critique de l'agrégat bi-dimensionnel. Dans ce cas l'agrégat 2D est densifié et sa dimension fractale se rapproche de 2.

6. Matériaux magnétiques (Olivier LEBACQ)

Le formalisme ab-initio se prête particulièrement bien à la détermination des propriétés magnétiques de la matière, dont l'origine quantique trouve un cadre naturel d'étude au sein de ces méthodes, autorisant la prise en compte de phénomènes aussi divers que les effets relativistes scalaires et vectoriels (couplage spin-orbite) et polarisation de spin et orbitale. Ces méthodes peuvent désormais reproduire de manière précise des propriétés telles que les conditions d'apparition de ferro-, ferri-, antiferro-, et paramagnétisme. De la même manière, la direction et l'amplitude des moments magnétiques de volume, de surface ou de systèmes polyphasés, ainsi que les axes d'aimantation naturelle sont très bien décrits dans le cadre de ces théories. Par ailleurs, l'Energie d'Anisotropie Magnétocristalline (MAE), facilement accessible par les calculs ab-initio, constitue une information microscopique importante qui donne un bon indice de la tenue dans le temps de la direction d'aimantation naturelle.

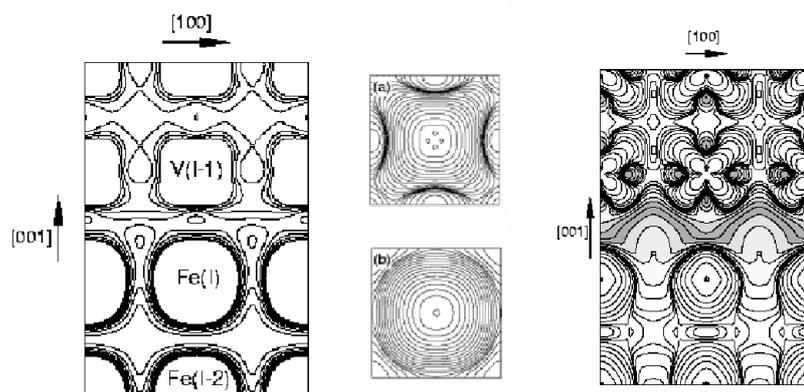


Figure 1 Densité de charge de la multicouche Fe_3V_5 dans la région interstitielle (gauche), et agrandissement de la densité de charge sur les sites de V (centre-haut) et de Fe (centre-bas) à l'interface. La densité de transfert de charge entre la multicouche Fe_3V_5 et les atomes isolés qui la composent est donnée sur la figure de droite

Ces deux dernières années, nos efforts se sont concentrés en collaboration avec O. ERIKSSON et B. JOHANSSON (université d'Uppsala, Suède) sur l'étude premiers principes des multicouches Fe-V ainsi que leur magnéto-résistance géante :

- Les profils magnétiques des multicouches Fe₂V₆, Fe₃V₅, et Fe₄V₄ ont été résolus.

Ils montrent l'existence d'une aimantation induite dans la couche de V à l'interface, et la nette diminution de l'aimantation à l'interface de Fe, en très bon accord avec les résultats expérimentaux obtenus à l'Institut de Physique expérimentale de Berlin.

Les effets ont été trouvés de courte portée (l'amplitude des moments varie peu en fonction du nombre de couches de Fe ou de V). L'analyse des densités d'états a démontré que l'apparition de cet ordre antiferromagnétique à l'interface provenait d'une hybridation dissymétrique entre les bandes up et down des couches interfaciques de Fe et de V.

- L'analyse des densités de charge et d'aimantation ont montré un transfert de charge notable de la couche de V vers la couche de Fe à l'interface. Ce transfert de charge n'intéresse que les orbitales T_{2g} pointant vers les atomes. L'aimantation fut observée dans les orbitales E_g. Elle est donc induite (par le transfert dans T_{2g}) dans les orbitales E_g par changement de spin de certains électrons, sans modification du nombre total d'électrons dans cette orbitale.

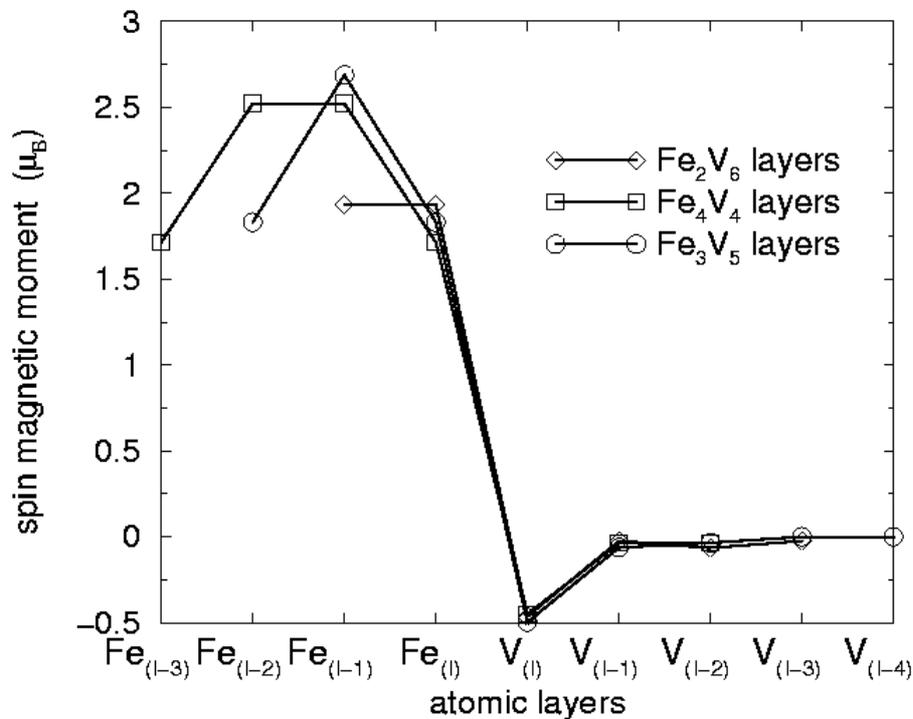


Figure 2. Profils magnétiques des multicouches Fe₂V₆, Fe₃V₅, et Fe₄V₄. L'indice (I) indique les atomes à l'interface.

- Les calculs d'énergie d'anisotropie magnéto-cristalline ont démontré une grande différence de comportement entre les trois systèmes avec des énergies et des axes d'aimantation préférentielle radicalement différents. Ce comportement apparemment surprenant a cependant été expliqué par la grande sensibilité de la MAE par rapport au rapport axial c/a (déformation tétragonale) et au volume atomique, qui se trouvent être très différents d'une multicouche Fe-V à l'autre. De surcroît, une forte dépendance de la MAE en fonction du remplissage de bande a pu être observée.

Cette étude a avant tout permis de mettre en évidence et de caractériser les différents paramètres dont dépend la MAE des multicouches Fe-V. Les données acquises nous permettent déjà de définir des modèles simples de dépendance de la MAE en fonction de ces paramètres influents, utiles à la compréhension et à la conception de nouvelles multicouches de MAE optimale.

7. Couplage spin-orbite et la "projector augmented-wave method" (PAW) (Olivier LEBACQ)

La méthode PAW, élaborée par P. Bloechl, est une méthode de calcul de structure électronique efficace basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, associant les méthodes existantes de pseudopotentiels et d'ondes augmentées, et capable de réaliser des études de relaxation de structure cristallographique et de dynamique moléculaire pour un grand nombre de systèmes d'étude. Néanmoins, ce type de formalisme ne comportait pas jusqu'à présent de terme de couplage spin-orbite. Les effets relativistes sont cependant des corrections nécessaires et importantes à apporter à l'hamiltonien d'un cristal dès lors qu'on s'intéresse par exemple à la structure électronique des actinides, ou à des propriétés de la matière qui en dérive directement, telle que la MAE.

La perspective de pouvoir allier études de relaxation de structure et calcul de MAE avec le même code de calcul PAW nous a amené à monter le terme de couplage spin-orbite dans le code de calcul VASP (Vienna ab-initio simulation Package). Ce travail a été effectué en collaboration avec G. KRESSE et J. HAFNER à l'université de Vienne.

8. Métallurgie-physique (Olivier LEBACQ)

Les défauts ponctuels sont en grande partie responsables des phénomènes de transport atomique intervenant dans le processus de diffusion. L'acquisition de leurs propriétés s'avère donc indispensable pour toute étude thermodynamique et cinétique réaliste des métaux et alliages. L'étude a essentiellement porté sur les métaux du groupe IV (Ti, Zr, Hf) pour lesquels les paramètres de défaut (énergie de formation et de migration) ne peuvent être déterminés de manière satisfaisante par les techniques expérimentales. Des calculs *ab-initio* des paramètres de défaut ont été effectués afin d'estimer ces grandeurs. Un fort effet de relaxation structurale autour de la lacune a été obtenu. Il explique de manière satisfaisante la forte anomalie d'auto-diffusion dans la phase bêta (cubique centrée) de ces matériaux (ordre de grandeur jusqu'à cinq fois supérieur à celui des autres métaux cubiques centrés). Ce travail a été réalisé en collaboration avec F. WILLAIME (SRMP, CEA Saclay).

Au carrefour entre la géologie et la physique des matériaux, nous avons entrepris une étude de la stabilité structurale du fer soumis à des conditions de pression et de température extrêmes. En effet, de nombreuses controverses demeurent quant à la nature de la phase adoptée par le Fe dans des conditions de pression et température proches de celles des couches profondes de la terre. Une série de calculs de dynamique moléculaire sur Fe effectués par A. BELONOSCHKO (Université d'Uppsala) a permis de mettre en évidence la possibilité de la stabilité du fer sous une forme cubique centrée dans ces conditions particulières de pression et de température, contrairement à la croyance généralement admise qui postulait une phase hexagonale compacte. Notre apport à ce travail a consisté principalement à apporter la confirmation *ab-initio* de ces résultats, réalisés à l'aide de potentiels empiriques de type EAM.

9. Croissance épitaxiale de GaN. Formation de goutte de Gallium (Philippe PEYLA)

Les dispositifs opto-électroniques à base de GaN (semi-conducteur à grand gap (3.47 eV en phase hexagonale)) sont maintenant produits de manière industrielle. On peut, grâce à des alliages tels que InGaN, fabriquer des diodes électro-luminescentes émettant dans le bleu. La croissance industrielle de GaN se fait par MOCVD (dépôt de métallo-organiques en phase vapeur). Cependant la croissance par épitaxie par jets moléculaires (EJM) (à plus basse température) permet d'offrir un matériau avec moins de défauts et des mesures ont montré que la mobilité électronique est beaucoup plus importante dans des couches obtenus par le procédé EJM.

Cependant la croissance EJM, si elle est prometteuse, demeure encore mal maîtrisée. En collaboration avec le groupe expérimental de Bruno Daudin du DRFMC (CEA-Grenoble), on a étudié la cinétique de formation de gouttes de gallium lors de la croissance épitaxiale de GaN en présence de magnésium (la présence d'impuretés de Mg permettant de réduire le taux de ré évaporation de l'azote).

On a, en bon accord avec l'expérience, calculé le taux de croissance de GaN ainsi que la densité de gouttes par unité de surface en fonction du flux de Ga.

10. Formation de Cloques (Philippe PEYLA).

Les dispositifs électroniques sont constitués de couches de différents matériaux. L'exemple le plus typique étant Si/SiO₂ dans les circuits intégrés. Quand ces systèmes subissent des échauffements, la différence de leur coefficient de dilatation thermique, provoque souvent une compression des films de SiO₂. Le matériau en compression peut alors se décoller (se délaminer) et une cloque apparaît. Cette cloque peut se propager sur des distances de l'ordre du dixième de mm, provoquant ainsi la destruction complète du dispositif.

Durant un séjour de un an à Montréal, à l'Université McGill en collaboration avec Martin Grant (Centre of the Physics of Materials) nous avons étudié la propagation de cloques lors de la délamination de films minces en compression. Un modèle basé sur l'élasticité non-linéaire des plaques minces (théorie de Von Karman) a permis de rendre compte de l'essentiel des observations expérimentales pour la formation de cloques ondulées.

B. Equipe *Théorie des Systèmes Mésooscopiques (Equipe créée en décembre 1999)*

Responsable : Frank HEKKING

<u>Permanents:</u> Frank HEKKING (UJF) Fabio PISTOLESI (CNRS) Peter SCHUCK (CNRS) * Frédéric FAURE (UJF) (Timothy ZIMAN**)	<u>Thèse:</u>
---	----------------------

* Chercheur invité depuis Janvier 2001

** Rattaché au LPM2C ; resident à l'Institut Laue Langevin.

Etudiants encadrés par Frank HEKKING :

- G. ITHIER, *Qubit Josephson couplé à un résonateur supraconducteur*, stage de magistère des Sciences de la Matière (2^{ème} année), Ecole Normale Supérieure de Lyon, soutenance septembre 2000
- R. FERONE et N. TOUITOU, *Transport thermoélectrique dans un fil quantique*, stage de maîtrise de l'Ecole de Physique de Grenoble, soutenance juin 2000.
- R. HERVE, *Supraconductivité dans des systèmes de dimensions réduites*, stage de magistère des Sciences de la Matière (1^{ère} année), Ecole Normale Supérieure de Lyon, soutenance septembre 2001
- L. FRITZ et Ch. SACHSE, *Transport thermique dans un fil quantique désordonné*, stage de maîtrise de l'Ecole de Physique de Grenoble, soutenance juin 2001.
- T. JOHANN *Temps tunnel et dynamique de la mesure quantique d'un résonateur supraconducteur*, stage de maîtrise de l'Ecole de Physique de Grenoble, soutenance juin 2001.
- J. DEGORRE *Dynamique d'une jonction Josephson couplée à un réseau de SQUIDS*, stage de DEA (Physique des Particules, Physique Mathématique et Modélisation) de l'Ecole Doctorale de Physique de Marseille, soutenance juin 2001.
- M.GARCIA-VERGNIORY *Décohérence dans une jonction Josephson couplée à un résonateur supraconducteur*, stage de DEA (Matière et Rayonnement) de l'Ecole Doctorale de Physique de Grenoble, soutenance juin 2001.

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 nouvelles technologies comme l'électronique moléculaire (nanotubes de carbone), les structures hybrides (jonction métal-matériau ferromagnétique) ou encore l'information quantique (systèmes photoniques, nanocircuits supraconducteurs). Les recherches de notre équipe se situent pleinement dans cette perspective et concernent le transport thermoélectrique dans des conducteurs nanostructurés, la supraconductivité mésoscopique ainsi que le bruit quantique.

La description physique des systèmes nanométriques est rendue compliquée par l'apparition des phénomènes particuliers. Par exemple, les petits systèmes ne sont pas auto-moyennant dans le sens de la limite thermodynamique. Les taux de relaxation sont souvent assez faibles, ce qui mène à des situations hors équilibre (par exemple lors du transport électrique). De plus, une description purement classique n'est pas toujours justifiée et des effets quantiques, le rôle des interactions, ainsi que des effets associés à la géométrie précise doivent être pris en compte. Un

intérêt particulier doit être porté au transport dans les systèmes hybrides. L'étude de telles structures formées de l'association de différents matériaux spécifiques (métalliques, magnétiques, supraconducteurs, semi-conducteurs, moléculaires,...) révèle de nouveaux effets physiques. Elle est donc source de nouvelles fonctionnalités pouvant être utilisées par exemple dans l'électronique du futur.

Les activités de recherche de notre équipe se déroulent en collaboration avec d'autres laboratoires grenoblois (CEA, CNRS) ainsi qu'avec des équipes à l'étranger. Nous avons notamment une étroite collaboration avec plusieurs équipes d'expérimentateurs grenoblois, en particulier sur le comportement quantique des nanocircuits supraconducteurs. Ces circuits apparaissent comme des candidats possibles à la réalisation du bit quantique, concept de base pour le traitement de l'information quantique.

1. Transport thermique dans un fil quantique (Frank HEKKING)

Dans la théorie du liquide 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 : la loi de Wiedemann-Franz (WF). Dans un conducteur mésoscopique, des effets quantiques ainsi que la présence d'interactions peuvent modifier la loi de WF.

Nous avons étudié le transport thermique dans un fil quantique de basse densité électronique. Dans un tel fil, l'énergie de Fermi est typiquement plus basse que l'énergie associée aux interactions Coulombiennes. En outre, l'écrantage devient moins efficace quand la dimensionnalité du système est réduite. Les fils les plus fins montrent un comportement vraiment unidimensionnel : les excitations à basse énergie sont de type ondes de densité de charges et de spins, se propageant à des vitesses différentes (séparation de spin et de charge). Un tel fil n'est pas un liquide de Fermi, on l'appelle *liquide de Luttinger*.

Nous avons montré que la loi de WF est de fait violée dans un fil quantique unidimensionnel en présence d'interactions entre les électrons. La conductance électrique G du fil n'est pas affectée par les interactions, tandis que la conductance thermique K est fortement renormalisée (diminuée). En particulier, le taux K/TG , qui est indépendant de la température T dans la théorie du liquide de Fermi (loi de WF), *diminue* si l'on augmente T .

Nous avons ensuite commencé par développer un formalisme qui permet de décrire le transport thermique dans un fil désordonné. Il est évident que la présence du désordre diminuera à la fois G et K , mais le taux K/TG pourrait soit diminuer, soit augmenter soit rester constant. Une compréhension détaillée des effets du désordre dans ce modèle simple nous aidera lors de notre étude plus compliquée des métaux désordonnés (voir la section prospectives ci-après).

2. Supraconductivité dans des petits grains (Peter SCHUCK, Frank HEKKING)

Depuis plus de cinq ans il existe un grand intérêt pour les propriétés supraconductrices des systèmes de dimension réduite (la supraconductivité mésoscopique). Très récemment on a commencé par étudier le comportement de petits grains supraconducteurs avec une taille typique située entre 5nm et 1 μ m. Le comportement de ces nanograins est très différent du comportement d'un système infini (de type bulk). Deux origines à cette différence sont bien connues : i) les effets associés à la parité du nombre total d'électrons dans le grain et ii) l'effet des fluctuations supraconductrices quantiques, qui deviennent importantes si l'écart entre les niveaux quantiques du grain devient de l'ordre du gap supraconducteur et qui mènent à un élargissement de la transition supraconductrice.

Nous avons étudié l'influence de l'effet conjugué de la parité et des fluctuations supraconductrices sur le comportement thermodynamique d'un nanograin supraconducteur. Nous avons en particulier calculé la susceptibilité magnétique χ de spin en fonction de la température T . Si le nombre d'électrons est impair, χ est une fonction non-monotone de T et montre un comportement de ré-entrance à basse température. Pour un nombre pair d'électrons, la susceptibilité est exponentiellement faible à basse température.

Nous nous sommes également intéressés au comportement du gap supraconducteur en fonction de la taille du grain. Remarquablement, le gap mesuré dans les petits grains peut être deux fois plus grand que le gap du bulk, un phénomène inexpliqué jusqu'ici. Inspiré par de récents résultats sur les noyaux superfluides en physique nucléaire, nous avons considéré l'effet des états électroniques à la surface du grain. Le poids de ces états est faible à la limite thermodynamique, mais devient non-négligeable pour un petit grain. Dans le cadre d'un modèle simple nous avons montré que les états de surface augmentent la densité d'états électronique ainsi que la force effective d'appariement. Il en résulte que le gap supraconducteur augmente.

3. Manipulation d'états quantiques dans les nanocircuits supraconducteurs (Frank HEKKING)

Le calcul quantique est une thématique naissante 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 informatique 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 aucun système physique ne remplit, aujourd'hui, toutes les conditions requises (long temps de décohérence, intégrabilité, reproductibilité des circuits).

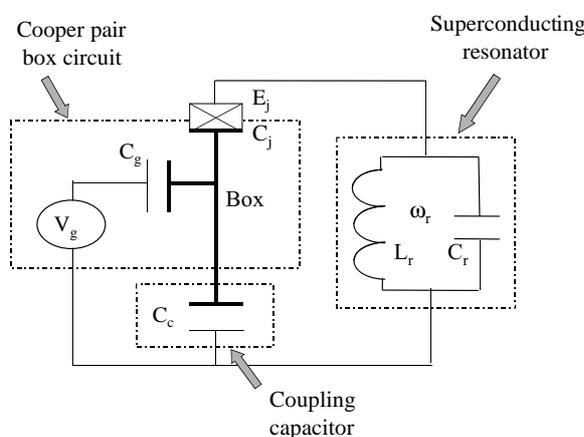


Figure 3 Nanocircuit supraconducteur : boîte à paires de Cooper couplée à un résonateur supraconducteur à travers une capacitance de couplage.

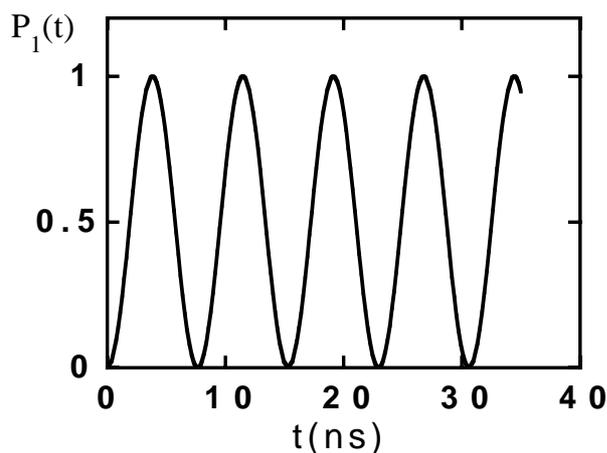


Figure 4 Oscillations de Rabi pour le circuit de la Figure 4: l'état quantique du résonateur oscille entre le fondamental et le premier état excité avec une fréquence déterminée par la capacitance de couplage.

Parmi les systèmes expérimentaux envisagés, les circuits quantiques à base de nano-jonctions Josephson supraconductrices sont prédits comme pouvant être des candidats potentiels. Des expériences récentes 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 bit quantique Josephson avant la décohérence du système. Cependant, le principe du calcul quantique est basé sur la manipulation des *états enchevêtrés* ce qui nécessite la réalisation d'un couplage cohérent de deux qubits. Jusqu'ici, les états enchevêtrés n'ont pas été observés dans les nanocircuits supraconducteurs.

Nous avons étudié théoriquement la dynamique d'un circuit quantique supraconducteur particulier, en vue d'une expérience sur l'enchevêtrement mise au point actuellement au CNRS-CRTBT Grenoble par O. Buisson. Le circuit comporte un bit quantique Josephson couplé à un résonateur LC supraconducteur par une faible capacitance de couplage. Nous avons déterminé l'évolution quantique dans le temps des états propres de ce système à deux niveaux en présence du résonateur. Nous avons notamment mis en évidence les états enchevêtrés qui résultent du couplage entre le bit quantique et le résonateur. Par exemple, la probabilité que le résonateur soit dans l'état excité oscillera en fonction du temps avec une fréquence déterminée par le couplage (oscillations de Rabi).

4. Spectre de l'Hélium 4 (Fabio PISTOLESI)

Pendant mon séjour à l'ILL, j'ai pu collaborer avec les expérimentateurs de l'institut, en particulier avec B. Fåk. J'ai développé un modèle phénoménologique pour décrire l'hybridation du spectre à une particule, avec les états à deux particules de l'Hélium-4 à très basse température. Le problème a été considéré pour la première fois il y a 40 ans par Pitaevskii et beaucoup de théories et d'expériences ont été faites jusqu'à aujourd'hui pour essayer de comprendre la région du spectre où l'hybridation a lieu. Une question très importante encore ouverte est la suivante : les théories prévoient que l'énergie des excitations stables doit être inférieure à deux fois l'énergie d'un roton, car la conservation de l'énergie empêche la désintégration de la quasi-particule. Mais les données plus récentes semblent indiquer une énergie d'excitation plus élevée. L'observation de ce phénomène a toujours été très difficile parce qu'il faut bien décrire le continuum à deux particules qui devient dominant. Le modèle que j'ai construit prend en compte cet effet et les comparaisons avec des données expérimentales qui ont été faites ont montré que l'excitation directe de deux excitations produit un effet non négligeable. Il a été alors possible d'obtenir la relation de dispersion de la quasi-particule jusqu'au point où le poids s'annule. On trouve que l'énergie est toujours inférieure à deux fois l'énergie du roton comme prévu par la théorie.

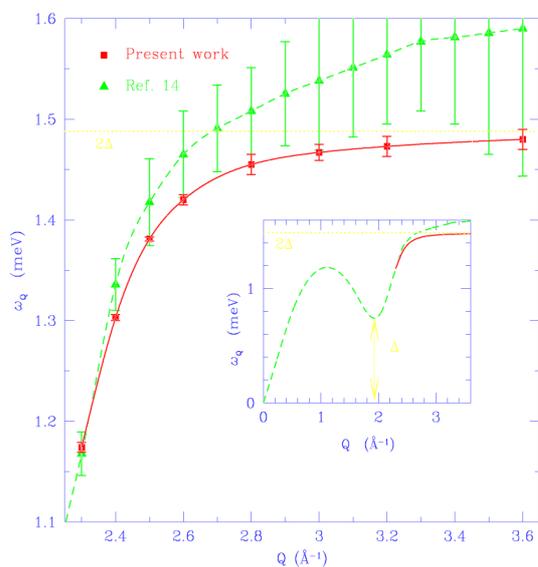


Figure 5 Spectre de l'Hélium 4 à basse température dans la région finale obtenue avec l'analyse théorique des données. Dans l'insertion le spectre complet.

5. Supraconductivité à partir d'un isolant (Fabio PISTOLESI)

En collaboration avec Philippe Nozières, nous avons pris en considération les expériences d'effet tunnel Andreev faites principalement par Guy Deutscher sur des supraconducteurs à haute T_c . Nous nous sommes interrogés sur la possibilité de réaliser un supraconducteur à partir d'un isolant. En effet, la théorie standard BCS considère que l'état normal d'un supraconducteur est un conducteur (métal). En réalité, cette théorie peut être facilement généralisée quand le niveau de Fermi est dans un gap de la

densité d'états. Dans ce cas, pour une interaction attractive suffisamment forte, on obtient un supraconducteur avec des caractéristiques non conventionnelles. En particulier on trouve une réalisation très simple d'un système dans lequel le gap d'excitation de quasi-particule est différent du paramètre d'ordre. Ce système, par sa simplicité, peut constituer un guide pour la compréhension du problème, beaucoup plus complexe, du *pseudo-gap* dans le spectre d'excitation, qui est observé expérimentalement dans la phase normale des supraconducteurs à haute température critique.

6. Phase géométrique hors diagonale (Fabio PISTOLESI)

En collaboration avec N. Manini nous nous sommes intéressés à l'étude de la phase de Berry et aux problèmes relatifs à sa mesure [M.V. Berry, Proc. R. Soc. Lond. A **392**, 45 (1984)]. L'intérêt pour une telle thématique est aussi lié à la possibilité d'utiliser les phases géométriques pour le calcul quantique. Stimulés par une expérience récente sur des cavités résonantes [H.-M. Lauber, P. Weidenhammer, and D. Dubbers, Phys. Rev. Lett. **72**, 1004 (1994)], nous avons généralisé le concept de phase de Berry aux cas où plusieurs états évoluent de façon adiabatique. En effet, si pendant l'évolution adiabatique un état devient orthogonal à son état initial, il n'est pas possible de définir la phase de Berry pour cet état. Néanmoins, si les états évoluent dans un sous-espace invariant, nous avons montré qu'il est possible de définir une relation de phase *géométrique mesurable* entre les différents états initiaux et finaux.

La relation de phase entre un état en évolution et le *même état* initial constitue la relation traditionnelle de Berry. Les facteurs de phase additionnels que nous avons introduits, fournissent toute l'information de phase mesurable, associée à l'évolution quantique de n états différents

Récemment Y. Hasegawa *etal* de l'Atominstutute de Vienne (Autriche) (dans le groupe du professeur H. Rauch) ont mesuré la phase géométrique que nous avons proposée sur le système à deux niveaux du spin neutronique.

C. Equipe *Ondes en Milieu Complexe*
 Responsable : Bart VAN TIGGELEN

<p><u>Permanents:</u></p> <p><u>Bart VAN TIGGELEN (CNRS)</u> Roger MAYNARD (UJF) Frédéric FAURE (UJF) Sergey SKIPETROV (CNRS)</p>	<p><u>Thèse:</u></p> <p>David LACOSTE (ENS Paris) Richard BRESSOUX (ENS Lyon) Nicolas TREGOURES (UJF) Renaud HENNINO (ENS Lyon: 50%) Felipe Arruda de A. PINHEIRO (CNPq Brésil)</p>
---	---

La symétrie est l'élément le plus important qui soit en physique. Elle permet de comprendre des aspects complexes sans considérer tous les détails du problème. La brisure d'une symétrie du milieu, que ce soit la symétrie par renversement du temps, la symétrie par rotation, ou la parité, constitue un défi pour des recherches scientifiques.

Dans l'équipe on a étudié, depuis quelques années, la diffusion multiple des ondes (lumière, acoustique, sismique, électrons, micro-ondes) dans des "milieux complexes", c'est-à-dire, dans des milieux fortement hétérogènes contenant des symétries brisées, comme les cristaux liquides nématiques (brisure de symétrie de rotation), et des terres rares sous champ magnétique (brisure de symétrie par renversement du temps), et ou des milieux chaotiques. La brisure est toujours accompagnée de nouveaux phénomènes, comme la diffusion anisotrope ou l'effet Hall photonique.

7. (co-) directions de thèse :

1. L. MARGERIN, *Diffusion Multiples des Ondes Elastiques dans la Lithosphère*, Université Joseph Fourier Grenoble 1, Décembre 11, 1998, Directeur de these: M. CAMPILLO (LGIT-Grenoble) ; co-direction : Bart VAN TIGGELEN
2. D. LACOSTE, *Diffusion Multiples dans des Milieux Magnétiques ou Chiraux*, novembre 29, 1999, Université Joseph Fourier Grenoble 1, directeur de thèse : Bart VAN TIGGELEN.
3. Anja SPARENBERG, *Light Propagation in Magnetic Fields*, le 9 Octobre, 2001 à l'Université de Constance, Directeur de thèse : Peter WYDER. co-directeurs de thèse, Geert RIKKEN (LCMI-Grenoble) et Bart VAN TIGGELEN
4. Richard BRESSOUX, *Phénomènes de Transport de la Lumière dans des Milieux Non Linéaires*, Juillet 2000, directeur de these : Roger MAYNARD
5. Nicolas TREGOURES, *Approche Mésoscopique des Ondes en Milieu Complexe: des Micro-Ondes aux Ondes Sismiques*, Université Joseph Fourier Grenoble 1, le 24 Septembre 2001. Directeur de thèse: Bart VAN TIGGELEN; co-directeur: Michel CAMPILLO.
6. Felipe PINHEIRO, *Magnéto-chiralité des Systèmes Désordonnés*, en thèse depuis octobre 2000, soutenance prévue octobre 2003, directeur de thèse : Bart VAN TIGGELEN.
7. Renaud HENNINO, *Propagation et Diffusion des Ondes Sismiques*, en thèse depuis octobre 1999, soutenance prévue juin 2002, directeurs de thèse : Michel CAMPILLO et Roger MAYNARD.

Etudiants encadrés par Frédéric FAURE:

- Mars-Juin 1999: un étudiant de Maitrise physique, UJF Grenoble. Sujet : "*Orbites périodiques instables et états cohérents. Interprétation de la formule de Gutzwiller semi-classique*"
- Mars-Juin 2000: un étudiant de Maitrise physique, UJF Grenoble. Sujet : "*Transport d'ondes dans un guide chaotique*"
- Mars-Juin 2001: Alexandre Ratchov, étudiant Maitrise physique, UJF Grenoble. Sujet : "*Chaos quantique et orbites périodiques dans le modèle du chat d'Arnold*"

1. Propagation des ondes en milieu aléatoire et non linéaire (Roger MAYNARD, Sergey SKIPETROV)

Le mariage du désordre et de la non-linéarité pose de beaux problèmes autant en physique fondamentale qu'en physique appliquée. On sait que dans les milieux fortement désordonnés tels que les suspensions colloïdales (le lait par exemple...) il se produit de fortes fluctuations de l'intensité des ondes lumineuses multiplement diffusées appelées tavelures ou « speckle » que l'on décrit par des fonctions de corrélations en fonction de paramètres variés comme le temps, les positions ou encore la fréquence des ondes. Les analyses de ces comportements en régime linéaire, sont toutes fondées sur le comportement diffus des intensités moyennées sur le désordre, des ondes régi par une constante de diffusion. A l'opposé de cette situation - fort désordre et linéarité - on sait que, en optique non linéaire, il se produit au-delà d'un certain seuil en intensité, des instabilités dans les systèmes homogènes comme par exemple la filamentation, dont les précurseurs sont par exemple le phénomène bien connu d'autofocalisation. Ces instabilités ont pour origine les effets de feedback, typiques des interactions non linéaires. Quand on marie les deux ingrédients, on peut s'attendre à une richesse de situation puisque par exemple le phénomène d'autofocalisation peut être contrarié par la diffusion. Dans ce contexte, nous avons essayé de répondre à deux questions parmi les plus simples:

- est-ce que le comportement *diffusif* des corrélations des intensités subsiste en régime de faible non-linéarité ?
- existe-t-il un seuil d'*instabilité* à faible non-linéarité pour la propagation des ondes en milieu diffus ?

Nous avons trouvé qu'un seuil d'instabilité existe et tend vers 0 lorsque la taille du système étudié est suffisamment grande. L'importance de ce résultat réside dans le fait que tout système désordonné, même avec des interactions non linéaires faibles, ne peut plus être décrit par une théorie de transfert radiatif lorsque sa taille est grande. Cela ouvre de nouvelles perspectives sur la question très controversée de *l'origine de l'irréversibilité* dans les systèmes chaotiques et ondulatoires.

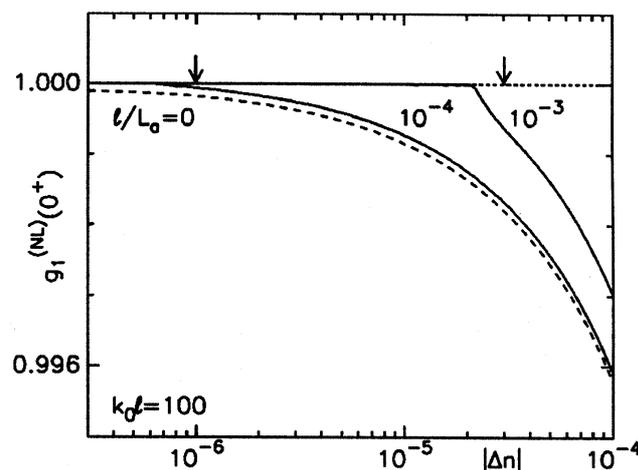


Figure 6 Diagramme de bifurcation pour une onde diffusée dans un milieu non linéaire et désordonné semi-infini. La figure montre les fonctions de corrélation temporelles du champ électrique, $g_1(t) = \langle E(t_1) E^*(t_1+t) \rangle$, de l'onde réfléchi en fonction de la modification moyenne de l'indice de réfraction non linéaire Δn dans la limite $t \rightarrow \infty$, pour trois valeurs différentes de la longueur d'absorption L_a (Skipetrov et Maynard, Phys. Rev. Lett., 2000).

Dans une première étape, nous sommes partis des analyses des corrélations des intensités en milieu linéaire qui conduisent aux comportements à courte et longue portée des fonctions de corrélation du type C(1), C(2) et C(3) et nous avons traité à l'ordre le plus bas du calcul de perturbation dont les paramètres sont les couplages non linéaires du type *chi 2* ou *chi 3*. De plus nous avons négligé les fluctuations des intensités qui interviennent dans ces couplages non linéaires. Dans ces conditions, nous avons trouvé que les corrélations sont encore décrites par les lois de la diffusion, modifiées par une longueur de décorrélation caractéristique combinant les couplages non linéaires et le libre parcours moyen du désordre. Des prédictions sont faites sur le changement des tavelures (« speckle ») à mesure que

l'intensité augmente. Nous avons l'espoir de voir bientôt une confirmation expérimentale. [thèse de Richard Bressoux, juillet 2000]

Au-delà du calcul perturbateur, nous avons développé une théorie « self-consistent » où la corrélation est obtenue à partir d'une expression du déphasage dû aux fluctuations des intensités le long des séquences de diffusion multiple, fluctuations qui dépendent elles-mêmes de ces corrélations. C'est la formulation habituelle d'une bifurcation au seuil d'instabilité. Les itérations successives montrent que lorsqu'un certain seuil est franchi, un nouveau point fixe apparaît : il représente une situation où un bruit spontané est amplifié et conduit à un régime chaotique. Le résultat le plus remarquable réside dans la propriété que le facteur de non-linéarité – très faible - est multiplié par des paramètres extensifs tels que la taille du système ou encore sa longueur d'absorption dont la valeur peut compenser la faiblesse des non-linéarités.

Une autre question qui a été abordée est l'existence de corrélations de tavelures (« speckle ») à très longue portée dans des systèmes aléatoires dont les sources sont peu étendues. Il est remarquable que les phases des ondes multiples diffusées ne soient pas des variables aléatoires indépendantes, même lorsque la distance entre les positions des détecteurs s'écartent à l'infini ! .. Nous avons considéré les effets d'atténuation de cette portée dus à la taille de la source ou encore à l'extension des objets diffusants.

2. Singularités de Van Hove sur la surface de Fermi (Roger MAYNARD)

Dans un autre registre, les effets des singularités de van Hove sur la surface de Fermi d'un métal à deux dimensions peuvent être détectés par des mesures de courant critique Josephson. Cette situation inhabituelle est due aux raccordements des fonctions d'onde lorsque le contact entre deux supraconducteurs à haut T_c produit un courant du type Sharvin plutôt que du type tunnel (où ne contribuent que les états de Bloch en correspondance directe sur la surface de Fermi).

3. Spectroscopie des ondes diffuses en milieu non-ergodique (Sergey SKIPETROV)

En collaboration avec le laboratoire de la matière molle (« Soft Condensed Matter Group ») à l'Université de Fribourg, Suisse (directeur Prof. P. Schurtenberger) nous avons adapté la technique de spectroscopie des ondes diffusées (« diffusing-wave spectroscopy », DWS) aux milieux non-ergodiques. On définit les milieux non-ergodiques comme ceux pour lesquels la moyenne d'ensemble sur le désordre ne peut être remplacée par une moyenne temporelle. La moyenne d'ensemble est toujours très difficile (et parfois même impossible) à obtenir dans une expérience. Notre idée consiste à mettre une couche turbide supplémentaire derrière l'échantillon non-ergodique à étudier, ce qui rend ergodique (sous certaines conditions) le système de deux milieux. Ensuite, la théorie de diffusion nous permet d'obtenir la fonction de corrélation temporelle de l'échantillon non-ergodique à partir de celle mesurée pour le système à deux milieux. Nous avons appliqué cette méthode pour étudier le mouvement des particules dans des gels — milieux désordonnés et fortement non-ergodiques.

Une technique d'imagerie dynamique en milieux turbides a été développée en collaboration avec Dr. I.V. Meglinskii (Saratov, Russie). En accord avec les résultats précédents de l'équipe de Prof. G. Maret (Strasbourg, France), on a établi la possibilité d'obtenir des « images corrélations » d'écoulements dans des milieux turbides sous les conditions de diffusion multiple des ondes optiques utilisées.

4. Magnéto-optique en milieux aléatoires (Bart VAN TIGGELEN, David LACOSTE, Felipe PINHEIRO)

Collaboration avec Geert RIKKEN et Peter WYDER (Laboratoire des Champs Magnétiques Intenses de Grenoble)

C'est la force de Lorentz appliquée à la charge électrique en mouvement qui produit un changement de direction perpendiculairement à la fois au champ magnétique et à la direction de propagation. Elle est à

l'origine de l'effet Hall électronique, bien connu en physique de la matière condensée. De même que la résistance des métaux est due à la diffusion multiple des électrons, l'effet Hall est une conséquence directe de la force de Lorentz en régime de diffusion multiple. Pour la magnéto-résistance, c'est-à-dire une résistance qui dépend du champ magnétique, c'est la même chose.

En 1995 l'existence de l'effet Hall photonique a été prédite en diffusion multiple de la lumière dans un champ magnétique. C'est la rotation Faraday dans les diffuseurs qui est responsable de cet effet transverse inattendu. Le calcul a été effectué rigoureusement en régime de Mie par David LACOSTE (travail de thèse). La théorie de magnéto-Mie, développée par LACOSTE et VAN TIGGELEN en 1998/1999 a été appliquée pour comprendre la retro-diffusion sous champ magnétique et l'effet Hall photonique dans des ferrofluides.

Un nouveau défi se présente dans des milieux qui sont chiraux (brisure de parité) et inhomogènes. Cette étude pourrait mener à des applications en imagerie médicale, où la chiralité est provoquée par le sucre dans le sang. On voudrait comprendre comment le transfert radiatif, la polarisation de la lumière en particulier, sera affecté par la chiralité.

On a l'intention de poursuivre la collaboration avec l'équipe '*magnéto-optique*' de Geert RIKKEN, au LCMI de Grenoble. Dans cette équipe on a, pour la première fois, observé le dichroïsme magnéto-chiral, un effet magnéto-optique présent dans un milieu chiral sous champ magnétique. Notre but final sera de décrire théoriquement cet effet en diffusion multiple. C'est l'objet de la thèse de Felipe PINHEIRO, recruté en septembre 2000.

5. Spectroscopie des micro-ondes en milieu diffus (Bart VAN TIGGELEN, Nicolas TREGOURES)

Comme il l'a été dit précédemment, les tavelures sont des fluctuations d'intensité provoquées par la nature ondulatoire des électrons ou des photons. L'intensité a une distribution de Rayleigh. La phase est une variable aléatoire, uniformément distribuée entre $-\pi$ et $+\pi$, et n'est donc pas très intéressante à étudier. Dans la littérature concernant la mésoscopie, la statistique gaussienne est connue sous le nom de C_1 . Les statistiques C_2 et C_3 existent également, et font appel à des corrections non-gaussiennes aux tavelures.

Quelle est la distribution de probabilité de la dérivée de la phase par rapport à la fréquence (ou en mécanique quantique: par rapport à l'énergie) ? Elle n'a pas été trouvée dans la littérature. Pourtant cette dérivée, avec la dimension d'un temps, a une signification importante, fournie par WIGNER déjà en 1946. Elle donne une estimation du *temps de retard* (delay time) subi par les ondes lors de leur diffusion.

En milieu désordonné, la "diffusion" fait appel à la marche aléatoire entre deux points. La statistique du temps de retard a été obtenue théoriquement et expérimentalement, deux primeurs, en collaboration avec l'équipe de Queens College du professeur Azriel GENACK (New York), et du Laboratoire de la Physique de la Matière Condensée/CNRS à Nice (Patrick SEBBAH). Elle obéit à une loi algébrique.

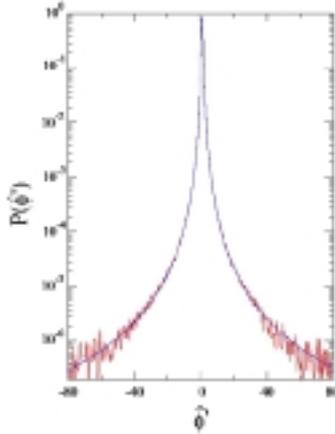


Figure 7 Distribution statistique du temps de retard de Wigner, donnée par la dérivée de la phase ondulatoire par rapport à la fréquence, mesurée avec des micro-ondes qui se propagent dans une tune désordonnée. En trait plain : la prédiction théorique. (Genack, Sebbah, Stoychev et Van Tiggelen, Phys. Rev. Lett. 1999).

Avec des micro-ondes il est possible de mesurer la phase des ondes diffusées. Cette expérience serait impossible en électronique et est déjà très difficile en optique. Voilà un exemple de la complémentarité de la mésoscopie des ondes classiques et celle des ondes de De Broglie. L'accord entre théorie et expérience est excellent : l'écart relatif est de 1 sur 10^6 .

6. Propagation des ondes sismiques: vers la kilo-physique.... (Bart VAN TIGGELEN, Renaud HENNINO)

Collaboration avec Laboratoire de Géophysique Interne et Tectonophysique (Michel CAMPILLO, Ludovic MARGERIN, Anne PAUL)

Après chaque tremblement de Terre ou explosion nucléaire, les sismomètres placés à la surface du globe enregistrent la propagation des ondes élastiques à travers le globe. Jusqu'à présent, l'attention des sismologues a été focalisée sur l'interprétation des temps d'arrivée à l'aide de la théorie des rayons. En réalité cette approche n'explique qu'une très faible partie des données, car les observations montrent l'existence d'ondes diffusées partout par la structure 3D de la Terre.

Aki et Chouet sont les premiers à avoir reconnu l'existence d'ondes diffractées aléatoirement en sismologie pour des fréquences f comprises entre 1 et 20 Hz. L'énergie élastique mesurée après un tremblement de terre décroît exponentiellement avec le temps. La constante de temps de cette décroissance est décrite par un facteur de qualité, appelé Coda Q, qui est un paramètre régional, et indépendant de la distance du tremblement de terre et de sa magnitude. Depuis, une polémique a démarré sur l'interprétation de la Coda Q : a-t-elle comme origine l'absorption, la diffusion simple ou la diffusion multiple? La modélisation a consisté à essayer de comprendre les ondes de coda en résolvant l'équation du transfert radiatif. Récemment, grâce à une collaboration avec le Laboratoire de Géophysique et Tectonophysique (LGIT), nous avons proposé un nouveau mécanisme afin d'expliquer la décroissance. Dans ce modèle on fait appel à la diffusion multiple des ondes élastiques par la croûte terrestre en combinaison avec les réflexions internes des ondes sismiques à la surface libre de la terre (totale) et au Moho (partielle). Le Moho est la frontière entre le manteau et la croûte, à environ $H = 30$ km de profondeur et avec un saut de vitesse de 1. La séparation entre "absorption" et "diffusion" est très importante.

Le grand défi est d'obtenir une estimation du libre parcours moyen des ondes sismiques, et de séparer les effets de diffusion et d'absorption dans la coda. En utilisant une simulation Monte-Carlo, mise en place par Ludovic Margerin (ondes acoustiques) et Celine Lacombe (ondes vectorielles) pendant leur thèse, ce modèle fournit des valeurs pour Q qui sont en bon accord avec des observations effectuées au Mexique,

sans qu'on soit obligé de faire appel à une forte absorption intrinsèque des ondes. L'étude fournit la valeur $l^* \sim 30$ km pour le Mexique.

L'équipartition des ondes polarisées est un concept fondamental dans la théorie du transfert radiatif. Elle est connue en acoustique depuis les travaux de Weaver en 1982 et de Papanicolaou *et al.* En 1996. L'équipartition implique que le désordre mélange toutes les fonctions propres (dans une certaine gamme de fréquence) de façon aléatoire et "uniforme". Le régime d'équipartition est caractérisé par un rapport constant en fonction du temps entre l'énergie S de cisaillement (proportionnelle au carré de la divergence $\text{div } u$ du déplacement u) et l'énergie P de compression (proportionnelle au carré du rotationnel $\text{rot } u$ du déplacement u) ou en fait entre deux contributions quelconques à l'énergie élastique telles que l'énergie cinétique K et l'énergie potentielle totale $S + P$. L'équipartition est une propriété fondamentale du régime diffus, *quelle que soit la complexité du milieu hétérogène*. Pour un milieu infini on obtient pour le rapport $S/P = 10.4$

Est-ce que cette constante universelle est la même constante pour la géométrie de la croûte et une mesure qui s'effectue à la surface libre de la terre ? Cette question était le sujet de thèse de Nicolas Trégourès. Dans cette géométrie on doit tenir compte de l'existence des ondes de surface (ondes de Rayleigh), qui sont un mélange de cisaillement et de compression, et qui sont évanescentes dans la direction verticale. Evidemment, elles sont importantes pour une mesure à la surface libre. La théorie d'équipartition appliquée à cette géométrie prédit le rapport $S/P = 7.19$

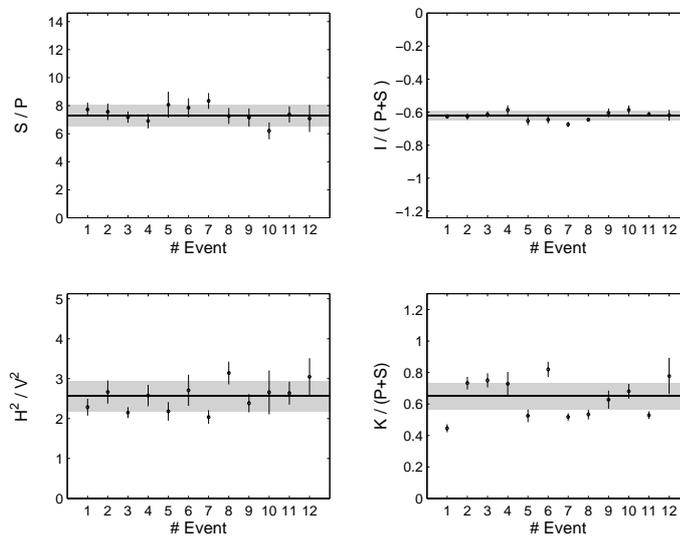


Figure 8 Observation de l'équipartition des ondes sismiques au Mexique. L'énergie élastique s'écrit comme une somme de l'énergie cinétique (K), de cisaillement (S), de compression (P), et un terme d'interférence (I) qui s'annule loin des bords. Les valeurs des différents rapports ont été évaluées pour différents tremblements de terre (« events »). Hennino, Trégourès, Shapiro, Campillo, Margerin, Van Tiggelen et Weaver, Physical Review Letters, 2001.

Récemment, l'équipartition a été confirmée de façon spectaculaire en sismologie. Dans une collaboration du LPM2C, LGIT, l'université de Urbana-Champaign (Richard WEAVER) et l'Instituto de Geofísica au Mexique (Nicolas SHAPIRO) on a pu séparer les ondes de cisaillement des ondes de compression par un mini-réseau de 4 sismomètres. On a montré que le rapport des différentes énergies se stabilise dans la coda du signal sismique, avec des valeurs numériques qui sont en accord avec les valeurs théoriques. Cette observation est une signature de l'équipartition, confirmant pour la première fois d'une façon *directe* l'importance de la diffusion multiple des ondes sismiques dans la croûte.

Un projet ACI Jeunes Chercheurs "Mesoscopie des Ondes Sismiques" a été retenu en 2001 par le Ministère de la Recherche (responsable: Bart VAN TIGGELEN). Dans ce projet on étudiera les effets d'équipartition dans le bruit sismique, et la propagation des ondes sismiques à l'échelle globale de la terre. On effectuera également des expériences, même sur le terrain.

7. Localisation forte d'Anderson (Bart VAN TIGGELEN)

La localisation forte à trois dimensions de la lumière a été annoncée par Wiersma et Lagendijk (Nature, décembre 1997), et par l'équipe de Azriel Genack en 2000 et 2001. En dépit de sa longue histoire depuis

l'article "Nobel" de P.W. Anderson en 1958, la localisation forte a toujours été un sujet difficile et controversé. L'observation de la localisation forte de la lumière - 40 ans après la prédiction d'Anderson - a provoqué aussitôt une polémique. Un article de revue a été rédigé par VAN TIGGELEN à l'occasion de l'École de l'OTAN (Les Houches, 1998) organisée par le Groupement de Recherche PRIMA du CNRS. Malgré les nombreuses études théoriques faites depuis 1958, il n'existait *aucune* théorie satisfaisante capable de décrire la propagation des ondes dans un système ouvert, en 3D, et en régime localisé. Une complication considérable consiste à décrire les bords du milieu de façon "raisonnable". Un premier effort avait déjà été fait par Berkovits et Kaveh en 1987. Ce travail faisait quelques prédictions qualitatives intéressantes, mais n'était pas suffisamment précis pour être confronté aux expériences.

Une nouvelle théorie a été formulée par VAN TIGGELEN, en collaboration avec LAGENDIJK (Amsterdam) et WIERSMA (Florence), qui devrait s'appliquer aux systèmes *finis et ouverts*, et est basée sur deux grands principes: la réciprocité ondulatoire et la conservation de l'énergie. Techniquement, elle prend comme point de départ l'approximation de diffusion et la théorie self-consistante de la localisation forte. Cette théorie, développée par Vollhardt et Wolfle en 1980, montre que la constante de diffusion est supprimée par des effets d'interférences constructives entre deux chemins opposés. C'est plutôt la géométrie demi-espace désordonnée qui s'applique aux expériences. Lorsque $kl \sim 1$ dans la demi-espace, la solution pour la constante de diffusion décroît algébriquement avec la distance du bord. La théorie prédit un arrondissement du profil angulaire de la rétrodiffusion cohérente, qui a été également observé dans les expériences effectuées à Amsterdam. Le grand défi pour l'avenir sera de généraliser cette théorie pour la dynamique des ondes en régime localisé. En collaboration avec LAGENDIJK des projets "*Waves in Complex Media*" ont été déposés en septembre 2001 aux Pays-Bas (auprès du FOM) et auprès de la communauté européenne (FP5) afin de recruter un post-doc.

8. Effets topologiques en physique moléculaire (Frédéric FAURE)

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'énergies se regroupent par bandes. Avec Boris Zhilinskii, physicien (en physique moléculaire) de Dunkerque, on a 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). Ce résultat montre qu'il serait possible de faire une description qualitative de spectres moléculaires complexes, 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. En particulier en a mis en évidence un nouveau phénomène, qui est celui de bandes "topologiquement couplées" (rédaction en cours).

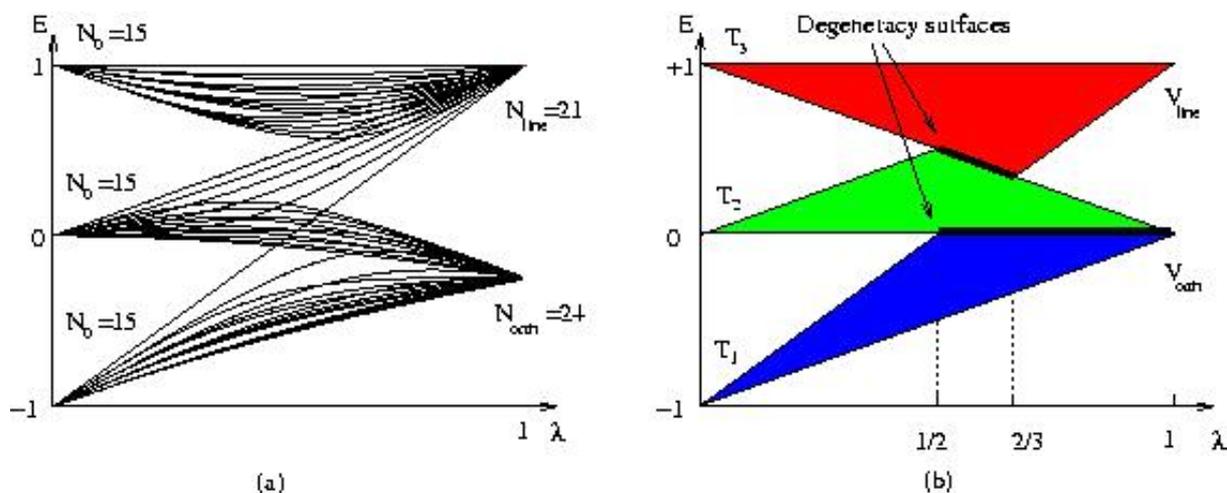


Figure 9 (a): Spectre exact dans un modèle de couplage entre vibrations (lentes) et 3 modes électroniques (rapides) d'une molécule. On observe des échanges de niveaux entre les groupes électroniques. (b): Spectre en bande dans l'approximation de Born-Oppenheimer, traitant les vibrations lentes par une variable classique continue. Dans cette

description, le contact entre bandes (dégénérescences) engendre un certain changement de topologie. On montre comment le changement de topologie est relié aux échanges de niveaux.

9. Chaos Ondulatoire (Frédéric FAURE)

En collaboration avec Stéphane Nonenmacher du CEA (SPth Saclay) et Stephan DeBièvre de l'université de Lille, nous nous intéressons à comprendre la dynamique quantique dans le cas chaotique, par une approche originale qui consiste à décrire l'évolution quantique entre les orbites périodiques instables du système classique.

Nous espérons ainsi obtenir des propriétés sur les fonctions d'ondes stationnaires et sur les énergies propres. Cela pourrait aider à comprendre par exemple pourquoi les matrices aléatoires reproduisent les propriétés statistiques des niveaux d'énergie, ou encore pourquoi certaines fonctions d'ondes sont curieusement très localisées sur des orbites périodiques instables (phénomène de « cicatrices » ou « scars »). Récemment, nous avons obtenu un nouveau résultat qui est d'exhiber et caractériser des états cicatrisés dans le modèle chaotique dit "du chat d'Arnold" (rédaction en cours).

Dans le cadre du GDR PRIMA, une collaboration est en cours avec le groupe de Robin Kaiser et Christian Miniaturat de l'INLN de Nice, qui cherchent à réaliser un guide d'onde optique d'une épaisseur (z) de quelques microns, et dont l'indice est modulé de façon périodique selon une direction (x). Dans le cadre de l'approximation des rayons, la dynamique présente du chaos.

En régime stationnaire, la propagation d'un faisceau laser dans un tel guide serait un exemple nouveau et simple de « chaos ondulatoire ». En se basant sur des études numériques et analytiques, j'ai obtenu des résultats concernant le nombre de modes de propagations dans un tel guide : une formule donne le nombre de modes de propagations en terme des trajectoires balistiques et des trajectoires diffusives dans le guide. Ce résultat se généralise, et s'appliquerait aussi pour des particules quantiques dans un potentiel périodique (des électrons dans une structure mésoscopique), et donnerait alors la conductance sans dimension de Landaueur.

10. Méthodes Semi-classiques (Frédéric FAURE)

L'analyse semi-classique est un outil mathématique permettant de comprendre les propriétés d'un système quantique (ou plus généralement d'un système ondulatoire, comme l'optique ondulatoire) à partir des lois d'évolutions de la mécanique classique (respect. optique géométrique). Il y a de très nombreuses applications en physique et c'est un domaine de recherche encore très prometteur. Pour les travaux, on a profité de la présence à Grenoble d'un groupe de mathématiciens spécialistes (Y. Colin de Verdières, B. Parisse, A. Joye, ...) qui sont aussi très ouverts aux applications physiques.

Dans ce cadre, un travail avec Bernard Parisse porte sur le rôle de l'effet tunnel dans un modèle de conductivité quantique de Hall. On obtient des résultats analytiques permettant de prédire la conductivité de Hall entière (faisant intervenir des indices topologiques) pour chaque sous-bande du spectre de Landau, à partir des propriétés classiques des trajectoires des électrons. Ces résultats sont confirmés par des études numériques, et pourraient bientôt être mesurés expérimentalement. On a ensuite montré comment ces calculs semi-classiques peuvent se faire pour un modèle général.

II.2 Bilan quantitatif sur les 4 dernières années concernant:

(* = travaux effectués par des permanents du LPM2C avant leur affectation)

** = publications de Tim ZIMAN, rattaché officiellement au LPM2C, mais résident à l'Institut Laue Langevin (Grenoble)

II.2.1 Publications majeures dans des journaux internationaux (P)

- P 1. [F.Faure, B.Parisse](#) [Étude semi-classique de l'effet Hall quantique](#). Journal of Mathematical physics, **41**, p 62-75, January 2000.
- P 2. [F.Faure](#), [Topological properties of quantum periodic Hamiltonians](#), Journal of Physics A: Math and General. vol **33** (2000) p531-555.
- P 3. [F. Faure](#), [B. Zhilinskii](#) [Topological Chern indices in molecular spectra](#), Physical Review Letters ,**85**, Issue 5, pp. 960-963 .
- P 4. [F.Faure](#), [B. Zhilinskii](#), [Topological properties of the Born-Oppenheimer approximation and implications for the exact spectrum](#), Letters in Mathematical Physics **55**: pp.219-238, 2001.
- P 5. [F. Faure](#) [Propagating modes in a periodic wave guide in the semi-classical limit](#) accepté à Journal of physics A: math and general.
- P 6. L. Margerin, M. Campillo and [B.A. van Tiggelen](#), [Radiative Transfer and Diffusion of Waves in a Layered Medium: A New Insight into Coda Q](#), Geophys. J. Int. **134**, 596 (1998).
- P 7. [D. Lacoste](#), [B.A. van Tiggelen](#), [G.L.J.A. Rikken](#) and [A. Sparenberg](#), [Optics of a Faraday-active Mie Sphere](#), JOSA **A15**, 1636 (1998).
- P 8. [G.L.J.A. Rikken](#) and [B.A. van Tiggelen](#), [Reply to Comment on " The Direction of Energy Flow in a Transverse Magnetic Field"](#), Phys. Rev. Lett. **80**, 1115 (1998).
- P 9. [D. Lacoste](#) and [B.A. van Tiggelen](#), [Stokes Parameters for Light Scattering from a Faraday-active Sphere](#), J.Q.S.R.T. (Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer) **63**, 305-319 (1999)
- P 10. [G.L.J.A. Rikken](#), [A. Sparenberg](#) and [B.A. van Tiggelen](#), [Photonic Magneto Transport](#), Physica B **246**, 247, 188 (1998).
- P 11. [B.A. van Tiggelen](#), [Optics of Diffuse Light in Nematic Liquid Crystals](#), Mol. Cryst. & Liq. Cryst., **321**, 197- 212 (1998)
- P 12. [G.L.J.A. Rikken](#), [B.A. van Tiggelen](#) and [A. Sparenberg](#), [Lichtverstrooiing in een Magneetveld](#), Nederlands Tijdschrift voor Natuurkunde **64/3**, 67 (1998).
- P 13. [D. Lacoste](#) and [B.A. van Tiggelen](#), [Transport Mean free Path for Magneto-transverse Light Diffusion](#), Europhys. Lett **45(6)**, 721 (1999).

- P 14. A.Z. Genack, P. Sebbah, M. Stoytchev and B.A. van Tiggelen, [Statistics of Wave Dynamics in Random Media](#), Phys. Rev. Lett. **82**, 412 (1999).
- P 15. B.A. van Tiggelen, P. Sebbah, M. Stoytchev and A.Z. Genack, [Delay-time Statistics for Diffuse Waves](#), Phys. Rev. E. **59**, 7166 (1999).
- P 16. L. Margerin, M. Campillo, N.M. Shapiro and B.A. van Tiggelen, [Residence Time of Diffuse Waves in the Crust as a Physical Interpretation for Coda Q; Applications to Seismograms recorded in Mexico](#), Geophys. J. Int. **138(2)**, 343 (1999).
- P 17. B.A. van Tiggelen and H. Stark, [Nematic Liquid Crystals as a New Challenge for Radiative Transfer](#), Rev. Mod. Phys. **72(4)**, 1017-1039 (2000)
- P 18. D. Lacoste and B.A. van Tiggelen, [Coherent Backscattering of Light in a Magnetic Field](#), Phys. Rev. E. **61**, 4556 (2000).
- P 19. B.A. van Tiggelen, D. Lacoste and G.L.J.A. Rikken, [Magneto-Optics with Diffuse Light](#), Physica B **279**, 13 (2000) .
- P 20. S. Wiebel, A. Sparenberg, G.L.J.A. Rikken D. Lacoste and B.A. van Tiggelen, [The Photonic Hall Effect in Absorbing Media](#), Phys. Rev. E. **62**, 8636 (2000).
- P 21. G. Duechs, A. Sparenberg, G.L.J.A. Rikken and B.A. van Tiggelen, [The Photon Hall Effect in Inverted Media](#), Phys. Rev. E. **62**, 2840 (2000).
- P 22. L. Margerin, M. Campillo and B.A. van Tiggelen, [Monte-Carlo Simulation of Multiple Scattering of Elastic Waves](#), J. Geoph. Res. **105(B4)**, 7873 (2000).
- P 23. B.A. van Tiggelen, A. Lagendijk and D.S. Wiersma, [Reflection and Transmission of Waves near the Localization Threshold](#), Phys. Rev. Lett. **84**, 4341 (2000).
- P 24. 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).
- P 25. D. Lacoste, F. Donatini, S. Neveu, J.A. Serughetti and B.A. van Tiggelen, [Photonic Hall Effect in Ferrofluids: Theory and Experiments](#), Phys. Rev. E **62**, 3934 (2000).
- P 26. B.A. van Tiggelen, M. Campillo and L. Margerin, [Coherent Backscattering of Elastic Waves: Role of Source, Polarization and Near Field](#), J. Acous. Soc. Am. **110(3)**, 1291-1298 (2001).
- P 27. B.A. van Tiggelen, A. Lagendijk, and D.S. Wiersma, [Radiative Transfer of Localized Waves, a local diffusion theory](#), Photonic Crystals and Light Localization in the 21th Century, (Kluwer, Dordrecht, 2001) page 475.
- P 28. 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).
- P 29. R. Hennino, N. Tregoures, 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. **89** 3447 (2001).
- P 30. N.P. Tregoures and B.A. van Tiggelen, [Quasi-Two Dimensional Transfer of Elastic Waves](#), Phys. Rev. E, 2001, accepté.

- P 31. [N.P. Tregoures](#) and [B.A. van Tiggelen](#), [Generalized Diffusion Equation for Elastic Waves](#), *Waves in Random Media* **12**, 21 (2002)..
- P 32. [N.P. Tregoures](#), [R. Hennino](#), [C. Lacombe](#), [N. Shapiro](#), [L. Margerin](#), [M. Campillo](#), and [B.A. van Tiggelen](#), [Multiple Scattering of Seismic Waves](#), *Ultrasonics*, a paraître.
- P 33. [S.E. Skipetrov](#) and [R. Maynard](#), [Instabilities of waves in nonlinear disordered media](#), *Phys. Rev. Lett.* **85(4)**, 736-739 (2000).
- P 34. [S.E. Skipetrov](#), [Temporal fluctuations of waves in weakly nonlinear disordered media](#), *Phys. Rev. E* **63**, 056614 (2001).
- P 35. [F. Scheffold](#), [S.E. Skipetrov](#), [S. Romer](#), and [P. Schurtenberger](#), [Diffusing-wave spectroscopy of nonergodic media](#), *Phys. Rev. E* **63**, 061404 (2001).
- P 36. [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](#), *Prog. Colloid Polym. Sci.*, soumis (2001).
- P 37. [S.E. Skipetrov](#), [Effect of absorption on temporal correlation of light scattered from a turbid medium](#), *Opt. Commun.* **152(4-6)**, 229-232 (1998).
- P 38. [S.E. Skipetrov](#) et [R. Maynard](#), [Nonuniversal correlations in multiple scattering](#), *Phys. Rev. B* **62(2)**, 886-891 (2000).
- P 39. [*S.E. Skipetrov](#), [M.A. Kazaryan](#), [N.P. Korotkov](#), and [S.D. Zakharov](#), [Multiple light-scattering probes of laser-induced particle flows in random media: Theoretical consideration](#), *Physica Scripta* **57(3)**, 416-419 (1998).
- P 40. [M.A. Kazaryan](#), [N.P. Korotkov](#), [*S.E. Skipetrov](#), and [S.D. Zakharov](#), [Light-induced dynamic backscattering of laser pulses in randomly inhomogeneous media](#), *J. Russian Laser Research* **19(2)**, 186-189 (1998).
- P 41. [*S.E. Skipetrov](#), [S.S. Chesnokov](#), [S.D. Zakharov](#), [M.A. Kazaryan](#), [N.P. Korotkov](#), and [V.A. Shcheglov](#), [Multiple dynamic scattering of laser radiation on light-induced jet of microparticles in suspension](#), *Quantum Electronics* **28(5)**, 434-438 (1998).
- P 42. [*S.E. Skipetrov](#), [S.S. Chesnokov](#), [S.D. Zakharov](#), [M.A. Kazaryan](#), and [V.A. Shcheglov](#), [Ponderomotive action of light in the problem of multiple scattering of light in a randomly inhomogeneous medium](#), *JETP Lett.* **67(9)**, 635-639 (1998).
- P 43. [*S.E. Skipetrov](#) and [I.V. Meglinskii](#), [Diffusing-wave spectroscopy in randomly inhomogeneous media with spatially localized scatterer flows](#), *JETP* **86(4)**, 661-665 (1998).
- P 44. [A.A. Karabutov](#), [I.M. Pelivanov](#), [N.B. Podymova](#), and [*S.E. Skipetrov](#), [Direct measurement of the spatial intensity distribution of light in a scattering medium](#), *JETP Lett.* **70(3)**, 183-188 (1999).
- P 45. [A.A. Karabutov](#), [I.M. Pelivanov](#), [N.B. Podymova](#), and [*S.E. Skipetrov](#), [Determination of the optical characteristics of turbid media by the laser optoacoustic method](#), *Quantum Electronics* **29(12)**, 1054-1059 (1999).
- P 46. [*S.E. Skipetrov](#) and [S.S. Chesnokov](#), [Statistical moments of the imaging system parameters in the turbulent atmosphere](#), *Atmospheric and Oceanic Optics* **11(4)**, 311-315 (1998).

- P 47. [*S.E. Skipetrov](#) and S.S. Chesnokov, [Comparative analysis of two schemes of imaging through the turbulent atmosphere](#), Atmospheric and Oceanic Optics **11(7)**, 90-93 (1998).
- P 48. [*S.E. Skipetrov](#) and S.S. Chesnokov, [Analysis, by the Monte Carlo method, of the validity of the diffusion approximation in a study of dynamic multiple scattering of light in randomly inhomogeneous media](#), Quantum Electronics **28(8)**, 733-737 (1998).
- P 49. G.V. Grigoryan, S.D. Zakharov, M.A. Kazaryan, N.P. Korotkov, [*S.E. Skipetrov](#), and A.P. Tamanyan, [Light-induced motion of microparticles in suspension](#), Atmospheric and Oceanic Optics **13(5)**, 456-458 (2000).
- P 50. [*S.E. Skipetrov](#) and M.A. Kazaryan, [Diffusion-wave spectroscopy of light-induced flows](#), Atmospheric and Oceanic Optics **14(5)**, 344-350 (2001).
- P 51. J.C. Lasjaunis, H. Berger, F. Levy et [R. Maynard](#), [Low temperature Phonon Thermal Conductivity of the Quasi-1D Single Crystals Ta_{1-x}NbxSe₄₂I](#), J. of Low Temp. Phys. **111**, 5/6 (1998).
- P 52. Georg Maret and [R. Maynard](#), [Diffuse Wave Spectroscopy](#), in: *New Aspects of Electromagnetic and Acoustic Waves*, Springer Tracts of Modern Physics **144**, (1998).
- P 53. [R. Maynard](#), A. Smontara, J.C. Lasjaunis, [On the phonon Poiseuille flow in quasi-one dimensional crystal](#), Physica B **263-264** (1999) 678-682.
- P 54. G. Deutscher et [R. Maynard](#), [On the effect of the Van Hove singularities on the critical current of high-Tc junctions](#), Europhysics Letters, **49 (1)**, 81 (2000).
- P 55. [R. Bressoux](#) et [R. Maynard](#) [On the speckle correlation in nonlinear random media](#), Europhys. Lett., **50 (4)**, 460-465 (2000)
- P 56. [R. Bressoux](#) et [R. Maynard](#) [Fluid Mechanics of Photonic Gas in Nonlinear Media](#), Physica D **2845**, 1-5 (2002)
- P 57. S. Tournier, B. Vinet et [A. Pasturel](#), [Undercooling-induced metastable A 15 phase in the Re- W system by drop-tube processing](#), Phys. Rev. B **57**, 3340 (1998).
- P 58. L. Magaud, [A. Pasturel](#), G. Kresse et J. Hafner, [Ab initio calculations of structural properties of YSi₂ Surface](#), Phys. Rev. B **58**, 10857 (1998)
- P 59. [G. Jomard](#), L. Magaud et [A. Pasturel](#), [Full potential calculations using the generalized gradient corrections: structural properties of Ti, Zr, and Hf under compression](#). Phil. Mag. B **77**, 67 (1998).
- P 60. T. Petit, C. Lemaignan, [A. Pasturel](#) et B. Bigot, [Point defects in Uranium dioxide: a first-principles approach](#), Phil. Mag. B **77**, 779 (1998)
- P 61. [O. Lebacqz](#), [A. Pasturel](#), D. Nguyen Manh, A. Finel et R. Caudron, [Electronic structure, Cohesive properties and phase stability in Ni₃ V, Pd₃ V, and Pt₃ V compounds](#), J. of Alloys and Compounds **264**, 31 (1998)
- P 62. [G. Jomard](#), [A. Pasturel](#), G. Kresse et J. Hafner, [First-principles study of bonding in zirconia pseudopolymorphs](#), Phys. Rev. B **59**, 4044 (1999).
- P 63. N. Capron, S. Carniato, G. Boureau et [A. Pasturel](#), [Study of oxygen vacancies in silica using ultrasoft pseudopotentials](#), J. Non Cryst. Solids **245**, 146 (1999)

- P 64. V. Drchal, [A. Pasturel](#), J. Kudrnovsky, R. Monnier et P. Weinberger, [Theory of surface segregation in metallic alloys : the generalized perturbation method](#), Computational Materials Science **15**, 144 (1999)
- P 65. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Theoretical calculations of the \(Cu, Ag, Au –Ni\) miscibility gap](#), Z. für Metallkde 89, 863 (1998).
- P 66. [O. Lebacqz](#), F. Willaime et [A. Pasturel](#), [Unrelaxed vacancy formation energies in group IV elements calculated by FPLMTO method : invariance with crystal structure](#), Phys. Rev. B **59**, 8508 (1999).
- P 67. [G. Jomard](#), L. Magaud et [A. Pasturel](#), [First principles investigation of the Zirconium \(0001\) surface structure](#), Phys. Rev. B. **60**, 15624 (1999).
- P 68. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Theoretical study of alloy phase stability in the Au-Ni system](#), J. of Alloys and Compounds **296** (2000) 6
- P 69. T. Petit, [G. Jomard](#), C. Lemaignan, B. Bigot et [A. Pasturel](#), [Localisation of single atoms of Krypton in Uranium dioxide](#), J. of Nuclear Materials **275** (1999) 119.
- P 70. [G. Jomard](#), L. Magaud et [A. Pasturel](#), [Oxygen adsorption on Zr \(0001\) : an ab initio approach](#), Molecular Simulation **24** (2000) 111
- P 71. L. Magaud, S.J. Sferco et [A. Pasturel](#), [Atomic structure of the c\(2x2\) Si/Cu \(110\) surface alloy from ab initio calculation](#), Phys. Rev. B **60**, 6034 (1999)
- P 72. [C. Berne](#), [A. Pasturel](#), M. Sluiter et B. Vinet, [Ab initio study of the metastability in refractory metal based systems](#), Phys. Rev. Letters **83**, 1621 (1999).
- P 73. [C. Berne](#), [A. Pasturel](#), M. Sluiter et B. Vinet, [Ab initio modelling of transitory metastable phases solidified by drop-tube processing](#), Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, **8** (2000) 233
- P 74. L. Magaud, [A. Pasturel](#), L. June, P. Mallet et J.Y. Veuillen, [In, Sn dimers on Si \(100\) 2x1 surface : ab initio calculations and STM experiments](#), Surf. Science **454** (2000) 1621
- P 75. N. Capron, S. Carniato, G. Boureau et [A. Pasturel](#), [Use of ultra soft potentials to study oxygen and silicon vacancies in silica](#), J. Chem. Phys. **112** (2000) 9543
- P 76. [J. Bouchet](#), F. Jollet et [A. Pasturel](#), [Electronic structure of \$\alpha\$ -Pu : LDA+U calculations](#), J. Phys. Cond. Matter **12** (2000) 1723
- P 77. [C. Berne](#), [A. Pasturel](#), M. Sluiter and B. Vinet, [Comparative study from drop-tube experiments and ab initio calculations of the nucleation of the sigma phase in the Re-W and Re-Ta systems during solidification far from equilibrium](#), J. of metastable and nanocrystalline materials **8** (2000) 3.
- P 78. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Phase stability and electronic structure in ZrAl₃](#), J. Alloys and Compounds **319** (2001) 154
- P 79. S. Jobic, R. Brec, [A. Pasturel](#) et M. Whangbo, [Survey of possible iridium ditelluride phases attainable under pressure based on electronic band structure study](#), J. Solid State Chem. (2001) .
- P 80. [A. Incze](#), C. Chatillon et [A. Pasturel](#), [Ab initio study of graphite prismatic surfaces](#), J. of Applied Surface **177** (2001) 221.

- P 81. [A.Incze](#), C. Chatillon et [A. Pasturel](#), [First-principles study of the atomic oxygen adsorption](#), J. of Applied Surface **177** (2001) 226.
- P 82. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Phase stability and electronic structure in HfAl₃ compound](#), Phys. Rev. B **64** (2001) 205102.
- P 83. [C. Berne](#), M. Sluiter et [A. Pasturel](#), [Site occupancy in the Re-W sigma phase](#), Phys. Rev. B **64** (2001) 144203.
- P 84. [G. Jomard](#) et [A. Pasturel](#), [On the effects of oxygen adsorption on the interlayer relaxation of the Zr \(0001\) surface](#), J. of Applied Surface **177** (2001) 230.
- P 85. [C. Berne](#), M. Sluiter et [A. Pasturel](#), [Ordering effects in the Re-W and Re-Ta sigma phases](#), J. Phys. Cond. Matter **13** (2001) 9433
- P 86. [C. Berne](#), M.Sluiter et [A. Pasturel](#), [Theoretical approach of phase selection in refractory metals and alloys](#), J. of Alloys and Compounds (2001)
- P 87. [C. Berne](#), B. Vinet et [A. Pasturel](#), [Germination et selection de phases dans les metaux et alliages refractaires](#), J. Physique IV, **11** (2001) 179
- P 88. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Ab initio calculations of the stability of one dimensional long period structures in Cu3Pd compound](#), Phil. Mag . B accepté (2002)
- P 89. L. Magaud, J.Y. Veuille et [A. Pasturel](#), [Instability of metallic In-Sn dimer lines on the Si \(100\) 2x1 surface](#), Phys. Rev. B accepté (2002)
- P 90. C. Colinet et [A. Pasturel](#), [Ab initio calculation of the formation energies of one dimensional long period structures in TiAl₃ compound](#), Intermetallics accepté (2002).
- P 91. [G. Jomard](#), L. Magaud et [A. Pasturel](#), [Point defects in ZrO₂ pseudopolymorphs](#), Phys. Rev. B, accepté 2002
- P 92. [Philippe Peyla](#), [Undulated blistering during thin film delamination](#), Phys. Rev. E, **62**, Rapid Communication, 1501 (2000).
- P 93. Bruno Daudin, Guido Mula, [Philippe Peyla](#), [Mg-modified surface kinetics of the GaN growth by molecular beam epitaxy](#), Phys. Rev. B, vol. **61**, 10330 (2000)
- P 94. B. Daudin, G. Mula, [P. Peyla](#), [Mg-induced kinetical changes in the growth of cubic and hexagonal GaN by Molecular Beam Epitaxy](#), Physica Status Solidi (a) Applied Research, vol. **176**, 385-389 (1999).
- P 95. J.Steinbrecher, H.Müller-Krumbhaar, E.Brener, C. Misbah and [P.Peyla](#), [Fractal Growth of Epitaxial Surface with Elastic Interaction](#), Phys. Rev. E **59**, 5600 (1999)
- P 96. [P.Peyla](#), A.Vallat, C.Misbah and H.Müller-Krumbhaar, [On elastic interaction between surface defects in thin layers](#) Phys. Rev. Lett. **82**, 787 (1999).
- P 97. [P.Peyla](#), A.Vallat and C.Misbah, [Elastic interaction between defects on a surface](#) Journal of Crystal Growth 201-202, 97-100 (1999)
- P 98. A. Pimpinelli and [P.Peyla](#), [Deposition and growth with desorption in molecular beam epitaxy](#), Journal of Crystal Growth **183**, 311-322 (1998)

- P 99. [P.Peyla](#), [A.Pimpinelli](#), [Joël Cibert](#) and [Serge Tatarenko](#), *Deposition and growth with desorption for CdTe molecular beam epitaxy*, Journal of Crystal Growth **184/185**, 75-79, (1998).
- P 100. [A. Huck](#), [*F.W.J. Hekking](#), and [B. Kramer](#), *Influence of quantum fluctuations on phase coherent two-electron tunneling*, Europhys. Lett. **41**, 201 (1998)
- P 101. [R. Fazio](#), [*F.W.J. Hekking](#), and [D.E. Khmel'nitskii](#), *Anomalous thermal transport in quantum wires*, Phys. Rev. Lett. **80**, 5611 (1998)
- P 102. [Ya. Blanter](#), [*F.W.J. Hekking](#), and [M. Büttiker](#), *Interaction constants and dynamic conductance of a gated wire*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1925 (1998)
- P 103. [M. Marini](#), [*F. Pistolesi](#), and [G.C. Strinati](#), *Evolution from BCS Superconductivity to Bose Condensation: Analytic Results for the crossover in three dimensions*, Eur. Phys. J. B **1**, 151 (1998)
- P 104. [*F. Pistolesi](#), *Theory and data analysis for the excitations in liquid ^4He beyond the roton minimum*, Phys. Rev. Lett. **81**, 397 (1998)
- P 105. [*F. Pistolesi](#), *Theory and data analysis for the high momentum end of ^4He spectrum*, J; Low Temp. Phys. **113**, 597 (1998)
- P 106. [A. Altland](#), [C.H.W. Barnes](#), [*F.W.J. Hekking](#), and [A.J. Schofield](#), *Magnetotunneling as a probe of Luttinger-liquid behavior*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1203 (1999)
- P 107. [L.I. Glazman](#), [*F.W.J. Hekking](#), and [A.I. Larkin](#), *Spin-charge separation and Kondo effect in an open quantum dot*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1830 (1999)
- P 108. [*F.W.J. Hekking](#), [A. Di Lorenzo](#), and [R. Fazio](#), *Re-entrant spin-susceptibility of ultrasmall superconducting grains*, Advances in Solid State Physics **39**, 323 (1999)
- P 109. [A. Di Lorenzo](#), [G. Falci](#), [R. Fazio](#), [G. Giaquinta](#), [A. Mastellone](#), and [F.W.J. Hekking](#), *Properties of ultrasmall superconducting grains*, Journal of the Korean Physical Society **34**, S155 (1999)
- P 110. [R. Fazio](#), [F.W.J. Hekking](#), [A.A. Odintsov](#), and [R. Raimondi](#), *Properties of superconductor-Luttinger liquid hybrid systems*, Superlattices and Microstructures **25**, 1163 (1999)
- P 111. [*F. Pistolesi](#) and [G.C. Strinati](#), *Evolution from BCS superconductivity to Bose-Einstein condensation: mapping of the fermionic onto a bosonic system in the strong coupling limit*, International Journal of Modern Physics B **13**, 667 (1999)
- P 112. [P. Nozières](#) and [*F. Pistolesi](#), *From semiconductors to superconductors: a simple model for pseudogaps*, Eur. Phys. J. B **10**, 649 (1999).
- P 113. [A. Di Lorenzo](#), [R. Fazio](#), [F.W.J. Hekking](#), [G. Falci](#), [A. Mastellone](#), and [G. Giaquinta](#), *Re-entrant spin susceptibility of a superconducting grain*, Phys. Rev. Lett. **84**, 550 (2000)
- P 114. [G. Falci](#), [R. Fazio](#), [F.W.J. Hekking](#), and [A. Mastellone](#), *Thermodynamics and spectral properties of ultrasmall superconducting grains*, J. Low Temp. Phys. **118**, 355 (2000)
- P 115. [*F. Pistolesi](#) and [N. Manini](#), *Geometric Phases and Multiple Degeneracies in Harmonic Resonators*, Phys. Rev. Lett. **85**, 1585 (2000)

- P 116. N. Manini and *[F. Pistolesi](#), *Off Diagonal Geometric Phases*, Phys. Rev. Lett. **85**, 3067 (2000).
- P 117. G. Falci, D. Feinberg, and [F.W.J. Hekking](#), *Correlated tunneling into a superconductor in a multiprobe hybrid structure*, Europhys. Lett. **54**, 255 (2001)
- P 118. I.S. Beloborodov, K.B. Efetov, A. Altland, and [F.W.J. Hekking](#), *Quantum interference and Coulomb interaction in arrays of tunnel junctions*, Phys. Rev. B **63**, 115109 (2001)
- P 119. L.I. Glazman, [F.W.J. Hekking](#), and A.I. Larkin, *Kondo effect and spin-charge separation in quantum dots*, International Journal of Modern Physics B **15**, 1426 (2001)
- P 120. P. Nozières, *[F. Pistolesi](#), and S. Balibar, *Steps and facets at the surface of soft crystals*, Eur. Phys. J. B **24**, 287 (2001).
- P 121. F. Willaime, A. Satta, M. Nastar, and *[O. Le Bacq](#), *Electronic structure calculations of vacancy parameters in transition metals : impact on the bcc self-diffusion anomaly*, Int. Journal of Quant. Chem, **77**, (2000), 927.
- P 122. *[O. Le Bacq](#), B. Johansson, and O. Eriksson, *First principles calculations of the magnetic profiles of the Fe-V multilayers*, J. Magn. Magn. Mat., **226-230**, (2001), 1722
- P 123. *[O. Le Bacq](#), O. Eriksson, and A. Delin, *Electronic structure, magnetic properties and chemical bonding at Fe/V interfaces*, accepté J. Phys. C : Cond. Mat.
- P 124. *[O. Le Bacq](#), O. Eriksson, B. Johansson, A. Delin and P. James, *First principles calculations of the magnetic anisotropy energy of Fe-V multilayers*, à paraître Phys. Rev. B (01 march 2002)
- P 125. A. Broddefalk, P. Nordblad, P. Blomquist, P. Isberg, R. Wäppling, *[O. Le Bacq](#), and O. Eriksson, *In-plane magnetic anisotropy of Fe/V (001) superlattices*, accepté J. Magn. Magn. Mat.
- P 126. J-Y Fortin, J. Bellissard, M. Gusmao, **[T. Ziman](#) *De Haas-van Alphen oscillations and magnetic breakdown: semiclassical calculation of multiband orbits*, Phys.Rev. B **57**, 1484 (1998).
- P 127. L.Brossard, R.Clerac, C.Coulon, M.Tokumoto, **[T.Ziman](#), D.Petrov, V.Laukhin, M.J.Naughton, A.Audouard, F.Goze, A.Kobayashi, H.Kobayashi, P.Cassoux, *Interplay between chains of S=5/2 localised spins and two dimensional sheets of organic donors in the synthetically built magnetic multilayers λ (BETS) $_2$ FeCl $_4$* , European Journal of Physics B**1**, 439(1998).
- P 128. J-Y Fortin, **[T. Ziman](#), *Frequency mixing of magnetic oscillations: beyond Falicov-Stachowiak theory*, Phys.Rev.Lett. **80** ,3117(1998)
- P 129. J-Y Fortin, **[T. Ziman](#), *Fortin and Ziman reply...*, Phys.Rev.Lett. **82** ,3117(1998)
- P 130. G.Bouzerar, O.Legeza, **[T.Ziman](#), *Minimal Hamiltonian to describe the magnetism of CuGeO $_3$* , Phys.Rev.B **60**,3521(1999)
- P 131. T.Sakai, O.Cepas, **[T. Ziman](#), *Selection rule of ESR for spin gap systems* J.Phys.Soc. Japan **69**,3521 (2000).

- P 132. B.Grenier, O.Cepas, L.P.Regnault, J.E.Lorenzo, ****T.Ziman**, J.P.Boucher, A.Hiess, T.Chatterji, J.Jegoudez, A.Revcolevschi, [Charge Ordering and Spin Dynamics in NaV₂O₅](#), Phys.Rev.Lett. **86** 5966(2001)
- P 133. O.Cepas, K.Kakurai, L.P.Regnault, ****T.Ziman**, J.P.Boucher, N.Aso, H.Kageyama, M.Nishi, Y.Ueda, [Dzyaloshinsky-Moriya Interaction in the Two-Dimensional System SrCu₂\(BO₃\)₂](#), Phys.Rev.Lett.**87**,167205 (2001).

II.2.2 Communications avec actes (c = avec comité de lecture) (C)

- C 1. [B.A. van Tiggelen](#), [Localization of Waves](#), in: [Wave Diffusion in Complex Media](#), lectures at Les Houches 1998, edited by J.P. Fouque, NATO Science Series, Vol. **531** , pp 1-60 (Kluwer, Dordrecht, 1999).
- C 2. [B.A. van Tiggelen](#), [Mesoscopic Wave Diffusion in Atomic Media](#), (Les Houches 1999), in: Atomic Matter Waves édité par F. David, C. Westbrook et R. Kaiser (Springer-Verlag, 2001, Heidelberg)
- C 3. ^C [B.A. van Tiggelen](#) and G.L.J.A. Rikken, [Manipulating Light in a Magnetic field](#), dans Optical Properties of Random Nanostructures, édité par V. M. Shalaev (Springer Verlag, Heidelberg, 2001) Topics in Applied Physics Vol. **82**.
- C 4. [S.E. Skipetrov](#) et [R. Maynard](#), [Diffusing wave spectroscopy in dynamically heterogeneous random media](#), in « Second GR-I International Conference on New Laser Technologies and Applications », A. Carabelas, P. Di Lazzaro, A. Torre, G. Baldacchini, Eds., Proc. SPIE **3423**, 252-256 (1998).
- C 5. I.V. Meglinsky, V.V. Tuchin, ***S.E. Skipetrov**, and S.S. Chesnokov, [Diffuse photon probes of dynamic nonhomogeneities in random high scattering media](#), in « MMET Conference Proceedings. 1998 International Conference on Mathematical Methods in Electromagnetic Theory (MMET'98) » (IEEE, New York, 1998), v. 2, pp. 927-929.
- C 6. ***S.E. Skipetrov**, S.S. Chesnokov, S.D. Zakharov, M.A. Kazaryan, N.P. Korotkov, and V.A. Shcheglov, [Dynamic multiple scattering of laser radiation on light-induced flows of microparticles in suspension](#), in « ICONO'98: Fundamental Aspects of Laser-Matter Interaction and New Nonlinear Optical Materials and Physics of Low-Dimensional Structures », K.N. Drabovich, V.I. Emelyanov, V.A. Makarov, Eds., Proc. SPIE 3734, 217-224 (1999).
- C 7. ***S.E. Skipetrov**, S.S. Chesnokov, I.V. Meglinsky, and V.V. Tuchin, [Diffusing-wave spectroscopy of flows](#), in « ICONO'98: Laser Spectroscopy and Optical Diagnostics: Novel Trends and Applications in Laser Chemistry, Biophysics, and Biomedicine », A.Yu. Chikishev, V.N. Zadkov, A.M. Zheltikov, Eds., Proc. SPIE 3732, 336-344 (1999).
- C 8. ***S.E. Skipetrov**, M.A. Kazaryan, S.D. Zakharov, and V.A. Shcheglov, [Hydrodynamic flows induced by copper-vapor laser: Diagnostics using optical correlation spectroscopy](#), in « Proceedings of the International Conference on LASERS'98 » (Soc. Opt. & Quantum Electron., McLean, VA, U.S.A., 1999), pp. 367-374.
- C 9. [S.E. Skipetrov](#), [Spatio-temporal speckle correlations for imaging in turbid media](#), in « Waves and Imaging through Complex Media »,} P. Sebbah, Ed. (Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 2001), pp. 435-443.

- C 10. *S.E. Skipetrov, M.A. Kazaryan, and S.D. Zakharov, [Correlation spectroscopy for diagnostics of light-induced particle motion in concentrated suspensions](#), in «Fourth International Conference on Correlation Optics», O.V. Angelsky, Ed., Proc. **SPIE 3904**, 423-428 (1999).
- C 11. A.A. Karabutov, N.B. Podymova, I.M. Pelivanov, *S.E. Skipetrov, and A.A. Oraevsky, [Direct measurement of axial distribution of absorbed optical energy in turbid media by time-resolved optoacoustic method](#), in «Biomedical Optoacoustics», A.A. Oraevsky, Ed., Proc. **SPIE 3916**, 112-121 (2000).
- C 12. *S.E. Skipetrov, M.A. Kazaryan, N.P. Korotkov, S.D. Zakharov, G.V. Grigoryan, and A.G. Tamanyan, [Multiple scattering of high-power laser radiation](#), in «Proceedings of the International Conference on LASERS'99» (STS Press, McLean, VA, U.S.A., 2000), pp. 681-684.
- C 13. G. Deutscher et [R. Maynard](#), [From the Andreev reflection to the Sharvin contact conductance](#), in "Gap symmetry and Fluctuations in High-Tc superconductors", J.Bok, G.Deutscher, D.Pavuna and S.Wolf editors, Plenum Press, NATO series, B; Physics, Vol.**371**, 1998
- C 14. [R. Bressoux](#) et [R. Maynard](#), [Speckle correlations and coherent backscattering in nonlinear random media](#), in Waves and Imaging through Complex Media, Kluwer Academic Publishers, éditée par Patrick Sebbah (2001).
- C 15. [O. Lebacqz](#), F. Willaime et [A. Pasturel](#), [Development of simple tight-binding models for transition metals](#), Publié dans les Proceedings du MRS (Boston 97), "Tight-binding Approach to Computational Materials Science", eds. A. Gonis, P.E.A. Turchi et C. Colombo. Vol. 491, 321.
- C 16. ^C [A. Pasturel](#), [A first-principles theory of metal-ceramic interfaces](#), Publié dans les Proceedings of High-Temperature Capillarity, (HTC-97). Eds N. Eustathopoulos and N. Sobczak, Foundry Research Institute, Cracow, Poland, p.3, 1998.
- C 17. ^C [A. Pasturel](#), [Ordering effects in disordered metallic alloys](#), Publié dans les Proceedings du MRS (Boston 97), "Tight-binding Approach to Computational Materials Science", eds. A. Gonis, P.E.A. Turchi et C. Colombo. Vol. **491**, 253
- C 18. ^C V. Drchal, J. Kudrnovsky, [A. Pasturel](#), P. Weinberger, [Effective Interatomic Interactions via the TB-LMTO method](#), Publié dans les Proceedings du MRS (Boston 97), "Tight-binding Approach to Computational Materials Science", eds. A. Gonis, P.E.A. Turchi et C. Colombo. Vol. **491**, 65.
- C 19. ^C [G. Jomard](#), L. Magaud et [A. Pasturel](#), [First-principles calculations to describe the energetics of Zr-O system](#), Publié dans les Proceedings du MRS (Boston 97), "Microscopic Simulation of Interfacial Phenomena in Solids and liquids", eds. P.D. Bristowe. S.R. Phillpot, D.G. Stroud et J.R. Smith. Vol. **492**, 789
- C 20. ^C [A. Pasturel](#) et B. Vinet, [Transitory metastable phases in refractory metals-based systems solidified by drop-tube processing: a first-principles approach](#), Publié dans les Proceedings du MRS (Boston 97), "Phase transformations and Systems driven far from equilibrium", eds. E. En Ma, P. Bellon, M. Atzmon et R. Trivedi. Vol **481**, 27
- C 21. ^C D. Nguyen Manh, D.G. Pettifor, [A. Pasturel](#) et O.K. Andersen, [Spin-polarized density of states and electron tunnelling from the Co-Al₂O₃ Interface](#). Publié dans les Proceedings du

MRS (Boston 97), "Microscopic Simulation of Interfacial Phenomena in Solids and liquids". eds. P.D. Bristowe, S.R. Phillpot, D.G. Stroud et J.R. Smith. Vol. **492**, 319.

- C 22. ^c C. Berne, A. Pasturel, M. Sluiter et B. Vinet, [First-principles study of metastability in metal-based systems solidified by drop-tube processing](#), Proceedings of MRS (Boston 1999), « Nucleation and growth processes in materials » ed. par A. Gonis, P.E.A. Turchi et A. Ardell. Vol **580**, 271.
- C 23. A. Pasturel, [Ab initio study of the structural stability of thin films](#), Stress and strain in Epitaxy: theoretical concepts, measurements and applications, ed. par M. Hanbücken et JP Deville, Elsevier Science (2001).
- C 24. L.I. Glazman, F.W.J. Hekking, and A.I. Larkin, [Kondo effect in a quantum dot in the strong tunnelling regime](#), in *Quantum Physics at Mesoscopic Scale*, edited by C. Glattli, M. Sanquer, and J. Trần Thanh Vân (EDP Sciences, Les Ulis, 2000), p. 287
- C 25. L.I. Glaman, F.W.J. Hekking, and A.I. Larkin, [Kondo effect in quantum dots](#), in *Statistical and Dynamical Aspects of Mesoscopic Systems* (Springer, Berlin, 2000), p. 16
- C 26. F.W.J. Hekking, [Magnetotunneling as a probe of Luttinger liquid behaviour](#), Proceedings of the XXXIV Annual Conference of the Finnish Physical Society (Helsinki University of Technology Publications in Engineering Physics, Espoo, 2000), p. 12
- C 27. O. Buisson and F.W.J. Hekking, [Entangled states in a Josephson charge qubit coupled to a superconducting resonator](#), in *Macroscopic Quantum Coherence and Quantum Computing*, edited by D.V. Averin, B. Ruggiero, and P. Silvestrini (Kluwer Academic, Dordrecht, 2000), p. 137
- C 28. F.W.J. Hekking, O. Buisson, F. Balestro, and M.G. Vergniory, [Cooper pair box coupled to a current-biased Josephson junction](#), in *Electronic correlations: from meso- to nano-physics* (EDP Sciences, Les Ulis, 2001).
- C 29. F. Faure and B. Zhilinskii " *Qualitative features of intra-molecular dynamics. What can be learned from symmetry and topology ?* " Acta Appl. Math. A paraître. .

II.2.3 Les conférences et séminaires invitées (I)

- I 1. F.Faure, [l'étude topologique et semi-classique de la conductivité de Hall entière](#)». Centre de physique théorique de Marseille (CPT). Octobre 98.
- I 2. F.Faure, [Propriétés topologiques des Hamiltoniens périodiques](#), au Laboratoire de physique mathématiques de Lille. Octobre 99:
- I 3. F.Faure, [Propriétés topologiques des Hamiltoniens périodiques](#), au colloque "journées semi-classiques" à Reims. Rencontres entre physiciens et mathématiciens. Janv. 2000 :
- I 4. F.Faure, [Conductance dans un potentiel périodique: rôle du chaos et des trajectoires ballistiques](#) au Laboratoire Phys non linéaire à Nice. Mai 2000 :
- I 5. F.Faure, [Rôle des indices topologiques en physique moléculaire et en physique du solide. Calcul dans des modèles simples](#), Exposé à l'école d'été interdisciplinaire à Dijon: "*Méthodes topologiques et géométriques; applications aux systèmes dynamiques, physique, chimie, biologie*". 26-30 juin 2000.
- I 6. F.Faure, [Indices topologiques dans les spectres moléculaires](#), à l'Institut de Physique nucléaire, Orsay. Janvier 2001.
- I 7. F.Faure [Topological properties of molecular spectra](#), à Lisbonne, colloque "Geometry, Symmetry and Mechanics". Juillet 2001.

- I 8. F.Faure, **Indices topologiques dans les spectres moléculaires**, à Montpellier, Laboratoire de Topologie. 30 novembre 2001.
- I 9. F.Faure, **Indices topologiques dans les spectres moléculaires** Conférence annuelle du GDR "Mathématiques et Physique Quantique" à Bordeaux. 28 janvier 2002.
- I 10. F.Faure, invité pour un séjour de deux mois, et pour donner une série de 6 cours. **Théorie adiabatique et indices topologiques en physique**, au CEA (Service Phys. théor. Saclay), mars-avril 2002 .
- I 11. F.Faure, Série de 3 cours à l'école de Printemps, **Semi-Classical and Quantum Multibody Systems**, Warwick Angleterre, 18-21 mars 2002.
- I 12. Bart van Tiggelen, Nantes, France (PIERS '98), **Mie Scattering in Magnetic Fields**, Juillet 1998.
- I 13. Bart van Tiggelen, Queens College, New York USA, **Applications of Wave Diffusion in Seismology**, septembre, 1998.
- I 14. Bart van Tiggelen, NASA Goddard Institute for Space Studies, New York USA (Conference on Light Scattering of Non-spherical Particles), **Mie Scattering in Magnetic Fields**, septembre 30, 1998
- I 15. Bart van Tiggelen, Kent State University, Liquid Crystal Institute, USA, **Multiple Scattering of Waves in Magnetic Fields and Nematic Liquid Crystals**, octobre 7, 1998.
- I 16. Bart van Tiggelen, University of Pennsylvania, USA, Light Localization and Transport, octobre 8, 1998.
- I 17. Bart van Tiggelen, Institut Fourier, Grenoble, Mécanique Ondulatoire en Régime Mésoscopique et la Localisation Forte d'Anderson, juin 1999.
- I 18. Bart van Tiggelen, Hong Kong University of Science and Technology (China), **Magneto-optics with Diffuse Light**, (ETOPIM-5: Electrical Transport and Optical Properties of Inhomogeneous Media), juin 1999.
- I 19. Bart van Tiggelen, Universität Stuttgart, Allemagne, **Wave Propagation in Complex Media**, octobre 19, 1999, Physikalischer Kolloquium
- I 20. Bart van Tiggelen, Universität Ulm, Allemagne, **Wave Propagation in Complex Media**, octobre 21, 1999, Physikalischer Kolloquium.
- I 21. Bart van Tiggelen, Grenoble (Séminaires théoriques de P. Nozières, Institut Laue Langevin), **Physique Mesoscopique avec des Micro-ondes**, décembre 1999.
- I 22. Bart van Tiggelen, Grenoble (LEPES), **Décohérence en Optique Quantique**, février 2, 2000.
- I 23. Bart van Tiggelen, Nice (Laboratoire de Physique de la Matière Condensée), **Une théorie locale de la localisation forte d'Anderson**, février 4, 2000.
- I 24. Bart van Tiggelen, University of Groningen, Institute for Theoretical Physics (Pays-Bas), **Waves in Complex Media**, Physics Colloquium, avril 6, 2000.
- I 25. Bart van Tiggelen, FORTH, Iraklion (Crète), 60 th. anniversaire de E.N. Economou, **Elastic Wave Diffusion in the Earth Crust**, juin 17, 2000.
- I 26. Bart van Tiggelen, Hersonissos (Crete), NATO Advanced Study School on Photonic Band Gap Materials and Light Localization, **Reflection and Transmission near the Localization Threshold**, juin 24, 2000.
- I 27. Bart van Tiggelen, Jeshiva University (New York City), **Mini-Conference on Propagation of Waves in New York City and other Disordered Media**, juillet 2000.
- I 28. Bart van Tiggelen, University of Illinois at Urbana-Champaign, **Wave Diffusion in Complex Media**, Physics Colloquium, Juillet 24, 2000.
- I 29. Bart van Tiggelen, Institut de Physique (Cargèse, Corse), **Ecole sur la Propagation des Ondes en Milieu Aléatoire et Non-linéair**, Propagation of Light in Magnetic Fields, septembre 5, 2000.
- I 30. Bart van Tiggelen, Université de Marne la Vallée, Paris, janvier 19, 2001, **Waves in Complex Media: Interdisciplinary Physics?**

- I 31. 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.
- I 32. Bart van Tiggelen, University of Delft (Pays-Bas), Ultrasonics International 2001, **Multiple Scattering and Equipartition of Seismic waves**, 2-5 Juillet 2001.
- I 33. Bart van Tiggelen, University of Delft (Pays-Bas), Department of Technical Physics, **Mesoscopic Wave Propagation in Complex Media**, 28 septembre 2001 (Colloque)
- I 34. Bart van Tiggelen, Universitaet Saarbruecken (Allemagne), Fraunhofer Institut fuer Zerstroerungsfreie Pruefung, **Mesoscopic Wave Propagation in Complex Media**, 26 novembre 2001 (physikalischer Kolloquium)
- I 35. Bart van Tiggelen, **Mesoscopie des Ondes Classiques: de la Nano vers la Kilo-physique**, journées nano-physiques IPMC, Grenoble, 18 décembre 2001.
- I 36. Bart van Tiggelen, **Mesoscopie des Ondes Classiques: de la Nano vers la Kilo-physique**, journées theoriques de la SFP, Institut Henry Poincaré, 30 Janvier 2002.
- I 37. Bart van Tiggelen, **Theory of Magneto-optics of random Media**, Physics in High Magnetic Fields, Les Houches 27 fevrier 2002.
- I 38. S.E. Skipetrov, **Statistics of intensity and total transmission for waves scattered from disordered media** (Université de Fribourg, Suisse, 21 aout 2001).
- I 39. S.E. Skipetrov, **Correlations of scattered waves** (Université de Marne-la-Valee, mai 2001)
- I 40. S.E. Skipetrov, **Recent developments in diffusing-wave spectroscopy** (Université de Nice, mai 2001).
- I 41. S.E. Skipetrov and R. Maynard, **Instabilities of speckles in nonlinear disordered media** (Ecole d'été « Propagation d'ondes en milieux diffusifs et non-linéaires », Cargese, Corsica, 3-9 septembre 2000).
- I 42. S.E. Skipetrov, **Recent developments in diffusing-wave spectroscopy** (Université de Fribourg, Suisse, mai 2000).
- I 43. S.E. Skipetrov, **Spatio-temporal speckle correlations for imaging in turbid media** (Ecole d'été « Ondes et imagerie en milieux aléatoires », Cargese, Corsica, 30 aout – 3 septembre 1999).
- I 44. R. Maynard, **Microscopic approach of the Multiple Scattering in Random Media**, Les Houches mars 1998.
- I 45. R. Maynard, **Progress in Electromagnetics Research Symposium**, Nantes, 13-17 juillet 1998,
- I 46. R. Maynard, **On the Poiseuille Flow in quasi-one dimensional crystal**, Lancaster, Juin 1998.
- I 47. R. Maynard, **Multiple scattering and related problems**, Rio de Janeiro et Natal, Janvier 1999.
- I 48. R. Maynard, **Non linearites in diffuse medium**, Cargèse Août 1999
- I 49. R. Maynard, **Chaos, Désordre et Déterminisme**, IUFM de Grenoble, février 1999 et février 2000.
- I 50. R. Maynard, **Wave Propagation and Electronic Structure**, Forth, Heraklion, 15-17 juin, 2000.
- I 51. R. Maynard, **Corrélations des speckle et instabilités des ondes en milieu non-linéaire et aléatoire**, Cargèse, 3-9 septembre 2000
- I 52. R. Maynard, **Wave Scattering in Complex Media**, Marne-la-Vallée, 18-19 janvier 2001.
- I 53. R. Maynard, **Instabilités dans les milieux diffusants et non linéaires**, ESPCI, 15 mars 2001
- I 54. A. Pasturel, D. Nguyen Manh et J. Hafner, **Spin-polarized electron tunnelling in the Co/Al₂O₃ interface, Interface Magnetism**, 2nd Annual Meeting, Wien Juin 1998

- I 55. N. Capron, S. Carniato, G. Boureau et A. Pasturel, **Simulation of Silica**, 2nd french-italian symposium on SiO₂ and advanced dielectrics, Italie Juin 1998.
- I 56. JP. Julien, J. Bouchet et A. Pasturel, **Electronic Structure of the delta phase of plutonium**, 4th Prague Colloquium on f-electron systems. Prague, 11-14 Juillet 1998.
- I 57. A. Pasturel, R. Monnier, V. Drchal et M. Borici-Kugo, **Surface Segregation in Pt-Rh alloys**, 6^{ième} Journées de la Matière Condensée et 17th General Conference of the Condensed Matter Division, Grenoble Août 1998
- I 58. J. Kudrnovsky, V. Drchal et A. Pasturel, **The theory of surface segregation in metallic alloys**, Workshop on TB-LMTO, St Odile (Strasbourg) Octobre 1998.
- I 59. A. Pasturel et D. Nguyen Manh, **Magnetic properties at the Co/Al₂O₃ interface**, Interface magnetism, 3rd Annual Meeting, Aussois Mars 1999.
- I 60. C. Berne, A. Pasturel et B. Vinet, **Ab initio transitory metastable phases solidified by drop-tube processing**, Thermodynamics and Structural Properties of Alloys Materials Aruba Juin 1999.
- I 61. A. Pasturel, **Ab initio thermodynamics and phase diagram calculations**, Congrès IWOMS, Hanoi Octobre 1999.
- I 62. N. Capron, G. Boureau et A. Pasturel, **Use of ultrasoft pseudopotentials to study defects in silica and germania**, 14th International Conf. On Defects in Insulating Materials, Johannesburg (Avril 2000)
- I 63. A. Pasturel, **Oxydation of zirconium: an ab initio approach**, Workshop on Catalysis: CECAM –Lyon (Juillet 2000)
- I 64. R. Tetot et A. Pasturel, **Ab initio study of defects in oxides, Density functional theory for the study of complex oxides**. Londres (Mai 2000)
- I 65. A. Pasturel, **Pu-based alloys: a LDA+U treatment**, Electronic properties of strongly correlated systems : CECAM –Lyon (Juillet 2001)
- I 66. A. Pasturel, **Theoretical approach on phase selection in refractory alloys**, Workshop on Thermodynamic and Structural Properties of Materials Avignon (Septembre 2001)
- I 67. A. Pasturel, **A first principal study of structural and electronic properties of Co/Al₂O₃ magnetic tunnel junction interface**, Oxide-metal interfaces: progress and challenges. CECAM-Lyon (Octobre 2001)
- I 68. C. Colinet et A. Pasturel, **Phase diagram calculations: contribution of ab initio and cluster variation methods**, TMS congrès : Hume-Rothery Award symposium Seattle (Février 2002)
- I 69. C. Colinet et A. Pasturel, **Ab initio study of one-dimensional long-period structures, TMS congrès** : Computational phase transformations Seattle (Février 2002)
- I 70. A. Pasturel, **First principles quantum mechanical predictions of alloy ground states**, 3^{ième} International Alloy Conf. (IAC-3) Estoril (Juillet 2002)
- I 71. F.W.J. Hekking, **Re-entrant spin susceptibility of ultra-small superconducting grains**, Frühjahrstagung der deutschen physikalischen Gesellschaft, mars 1999, Münster, Allemagne.
- I 72. F.W.J. Hekking, **Magnetotunneling as a probe of Luttinger-liquid behaviour**, XXXIV Annual Conference of the Finnish Physical Society, Espoo, Finlande, mars 2000
- I 73. F.W.J. Hekking, **Quantum Transport in Nanostructures: Coulomb and Interference effects**, Workshop on Nanophysics and Nanoelectronics, Les Houches, France, juin 2000
- I 74. F.W.J. Hekking, **Re-entrant spin susceptibility of ultra-small superconducting grains**, Les Houches 2000 Summerschool on Atomic Clusters and Nanoparticles, Les Houches, France, juillet 2000
- I 75. F.W.J. Hekking, **Manipulation des états quantiques de nanocircuits supraconducteurs**, 7^{èmes} Journées de la matière condensée, Poitiers, France, août 2000
- I 76. F.W.J. Hekking, **Transport thermique anormal dans un fil quantique**, 3^{ème} Colloque National GDR no. 1752 Nanotubes 2000, Toulouse, France, novembre 2000

- I 77. F.W.J. Hekking, **Entangled states in a Josephson charge qubit coupled to a superconducting resonator**, ULTI Symposium on Ultra Low Energy Physics: Methods and Phenomenology, Kisakeskus, Finlande, janvier 2001
- I 78. F.W.J. Hekking, **Entangled states in a Josephson charge qubit coupled to a superconducting resonator**, XXXVIth Rencontres de Moriond on Electronic correlations : from meso- to nano-physics, Les Arcs, Savoie, France, janvier 2001
- I 79. F.W.J. Hekking, **Transport phenomena in one-dimensional systems**, Kevo Spring School on Mesoscopic Physics, Kevo, Finland, avril 2001
- I 80. F.W.J. Hekking, **Supraconductivité mésoscopique**, Ecole Prédoctorale des Houches *Physique Mésoscopique*, Les Houches, France, septembre 2001
- I 81. F.W.J. Hekking, **Transport quantique dans un conducteur mésoscopique**, *Séminaire Daniel Dautreppe 2001, Grenoble, France, octobre 2001*
- I 82. *F. Pistolesi, **From semiconductor to superconductor: a simple model for pseudogaps** Conférence Nationale: Physique théorique et structure de la matière, Fai della Paganella (TN), Italie. 28-31 Mars 1999.
- I 83. *F. Pistolesi, **Infrared behavior of Interacting Bosons**, IUPAP International Conference on Statistical Physics, 20-24 Juillet 1998, Paris.
- I 84. *F. Pistolesi, **Theory and data analysis for excitations in liquid He4 beyond the roton minimum**, Université de Camerino, 11 février 1998, Italie.
- I 85. *F. Pistolesi, **Zero Temperature Renormalization-Group Approach to the Interacting Bosons Problem, and Theory and data analysis for excitations in liquid ⁴He beyond the roton minimum**, 23-26 Mai 1998, International Center for Theoretical Physics, Trieste, Italie.
- I 86. *F. Pistolesi, **Évolution de la supraconductivité BCS à la condensation de Bose: modes collectifs et température critique**. 22 Janvier 1999, séminaire dans le cadre du cours au Collège de France de P. Nozières.
- I 87. *F. Pistolesi, **Theory and data analysis for excitations in liquid 4He beyond the roton minimum**, 4 Février 1999, Scuola Normale Superiore, Pisa.
- I 88. *F. Pistolesi, **From semiconductor to superconductor: a simple model for pseudogaps**, April 1999, Université de Camerino.
- I 89. *F. Pistolesi, **Off Diagonal Geometric Phase**, 3 Novembre 1999, Université de Camerino.
- I 90. *F. Pistolesi, **Supracoducteur à partir d'un isolant: un modèle simple pour le pseudogap**, 18 Mai 2000, Groupe de Physique des Solides Universités Paris 6 & 7.
- I 91. *F. Pistolesi, **Supracoducteur à partir d'un isolant: un modèle simple pour le pseudogap**, 19 Juin 2000, Saclay, SPhT du CEA.
- I 92. *F. Pistolesi, **Superconductivity out of an insulator: a simple model for pseudo-gap**, 27 Novembre 2000, ESRF Grenoble.

II.2.4 Autres publications :

1. Bart van Tiggelen, **New Aspects of Electromagnetic and Acoustic Waves**, Springer Tracts in Modern Physics **144** (1998), editeur de la part du GDR POAN.

II.2.5 Les activités nationales et internationales

Alain PASTUREL

- Organisation de l'Ecole sur les calculs de structure électronique (Autrans Octobre 2000).
- Organisation de l'Ecole « Simulation à l'échelle atomique : de la théorie aux applications industrielles » (Autrans 2001)
- Création du GDR « Fonctionnelle de la densité et ses applications » 2002

Philippe PEYLA

- Collaboration avec l'Université McGill de Montréal , Canada. Séjour de un an du 1^{er} septembre 1999 au 1^{er} septembre 2000.
- Participation au programme PROCOPE France - Allemagne avec le Forshung Zentrum de Jülich, Allemagne.
- Participation au GdR Relax du CNRS.
- Membre de la jeune équipe CNRS GREPHE (Groupe de Recherche sur les Phénomènes Hors Equilibre) Laboratoire de Spectrométrie Grenoble, Responsable : Chaouqi Misbah.

Bart VAN TIGGELEN

- **NATO School on Wave Diffusion in Complex Media**, le 17-27 mars 1998, Les Houches, co-organisateur.
- 1998, - Membre du Conseil Scientifique du GDR 1847 PRIMA
- 17e General Conference of the Condensed Matter Division, Grenoble, août 25-29 1998, co-organisateur du mini-colloque **Scattering of Waves in Random Media** (avec Prof. Georg MARET, Constance)
- **Dautreppe-Conference Cohérence et Decohérence en Physique**, Grenoble, le 14-18 septembre 1998, co-organisateur (avec Laurent Lévy, Grenoble).
- Coordinateur du réseau européen (FP5) **Waves in Complex Media**. (Grenoble, Amsterdam, Florence, Saarbrücken, Karlsruhe, Paris, Valencia, Roma), en cours.
- 2001, co-directeur du projet NATO ASI **Wave Scattering in Complex Media: Foundations and Applications** (avec Sergey SKIPETROV), prévue à Cargèse, 2002.
- 2001, Coordinateur du projet Polonium **Localisation des Ondes Classiques sous Champ Magnétique** (du Ministère des Affaires Etrangères) avec Prof. A. Orłowski (Varsovie).
- Mini-Colloque **Physique Ondulatoire avec Des Atomes Froids**, Grasse, février 2001, organisateur (avec Christian MINIATURA de Nice et Dominique DELANDE de Paris).
- 2001, Coordinateur du **ACI Propagation et Mésoscopie des Ondes Sismiques**, (du Ministère de la Recherche)
- GRADUIERTENKOLLEGS: (responsable: Georg MARET, Constance) **Physique de la Matière Molle**: participant du projet (Grenoble - Strasbourg - Constance)

Frank HEKKING

- Depuis mars 2001 : membre du comité de pilotage **du Pôle d'Innovation en Micro- et Nanotechnologies (MiNaTec)** de Grenoble (chargé de mission de l'Université Joseph Fourier/Grenoble I).
- Membre du comité d'organisation de l'atelier **Entanglement at the Nanoscale**, 28 octobre - 8 novembre 2002, International Center for Theoretical Physics (ICTP), Trieste (Italy).
- Membre du comité d'organisation de l'Ecole Prédoctorale de Physique des Houches, Session XIV, **Physique Mésoscopique**, 2-14 septembre 2001, Les Houches.

- ❑ Membre du comité d'organisation de la session "**Nanophysique et Nanotechnologies**", organisée dans le cadre du Centre International de Rencontres Pluridisciplinaire (CIRP) de Grenoble Pôle Européen Universitaire.
- ❑ Membre du comité d'organisation du futur GDR **Physique Quantique Mésoscopique**, dirigé par Gilles MONTAMBAUX.

Frédéric FAURE

- ❑ Membre du GDR PRIMA 1847 du CNRS.

Sergey SKIPETROV

- ❑ Co-directeur d'Ecole OTAN « Diffusion des ondes en milieux complexes : De la théorie aux applications » (Cargèse, Corse 10-22 juin 2002).

Roger MAYNARD

- ❑ Mission de recherche au CBPF et à l'Université de Rio Grande do Norte du 25 février au 9 mars 1999.
- ❑ GRADUIERTENKOLLEGS: (responsable: Georg MARET, Constance) **Physique de la Matière Molle**: participant du projet (Grenoble - Strasbourg – Constance)
- ❑ Co-directeur du GDR PRIMA 1847 du CNRS.

II.2.6 Les contrats/subventions de recherche

Bart VAN TIGGELEN

- ❑ POLONIUM 2001 - 2003 (Ministère des Affaires Etrangères) : 19 kF TTC/an
- ❑ WAVE PHYSICS WITH COLD ATOMS, Colloque Grasse, février 2001 (Ministère de la Recherche) 20 kF TTC
- ❑ OTAN ASI projet Cargèse 2002 (OTAN, Division de la Science) 328 kF TTC (avec SKIPETROV)
- ❑ OTAN Advanced Study Institute projet Cargèse 2002 (GDR PRIMA) 45 kF
- ❑ Société Française de Physique (subvention de voyage) 2 kF
- ❑ ACI "Mésoscopie des Ondes Sismiques" 2001-2003: 450 kF (ministère de la recherche)

Frédéric FAURE

- ❑ Membre du Réseau européen, M. A .S. I.E.: Mechanics and Symmetry in Europe.

Alain PASTUREL

- ❑ Contrats de Recherche CEA-UJF :
 - Calculs de structure électronique sur le dioxyde d'Uranium
 - Modélisation de la zircone dopée
 - Modélisation des alliages de Plutonium
 - Sélection des phases dans les métaux et alliages réfractaires
- ❑ CPR Friction des Composites Carbone/Carbone
- ❑ Participation au GDR 687

Roger MAYNARD

- ❑ Contrat de Recherche avec le BRESIL CAPES/COFECUB

Frank HEKKING

- Participation dans *Information quantique : dynamique quantique des nano-jonctions Josephson*, projet scientifique en collaboration avec CNRS-CRTBT et CNRS-LCMI financé par l'Institut de Physique de la Matière Condensée (IPMC) de Grenoble (300 kF pour 2001).
- Participation dans le GDR 2285 *Information et Communication Quantique*, dirigé par Jean-Philippe POIZAT

II.2.7 Les brevets ou licences

II.2.8 La valorisation et le partenariat industriel, et les création d'entreprises

II.2.9 L'information scientifique et la vulgarisation scientifique

Bart VAN TIGGELEN, Nicolas TREGOURES et Michel CAMPILLO

Mais pourquoi la Terre tremble t-elle si longtemps?

CNRS INFO **395**, Juillet 2001

<http://lpm2c.polycnrs-gre.fr/Themes/tiggelen/cnrsinfo.pdf>

Earthquakes shake, rattle and roll

Physical Review Focus **7**, story 17

<http://focus.aps.org/v7/st17.html>

II.3 Déclaration de politique scientifique pour la période 2002-2005

II-3-1 note de synthèse sur les projets scientifiques (cette note de synthèse figure déjà dans l'avant propos)

Nos perspectives de recherche sont à plusieurs niveaux. Elles concernent tout d'abord les projets qui vont être développés respectivement au sein des trois équipes, mais aussi un projet fédérateur autour des nanosciences qui sera animé par Frank Hekking. Dans la partie Grands Thèmes et Projets nous présentons succinctement les projets de recherche des 3 équipes, que l'on retrouve de manière plus détaillée dans la partie projet scientifique.

Le renforcement du laboratoire au cours de ces deux dernières années ainsi que nos spécificités (relations très étroites avec le monde expérimental, interdisciplinarité, et usage quasi-systématique des méthodes numériques) nous ont conduits à réfléchir sur notre rôle dans le développement de la physique théorique à Grenoble. Nous proposons quelques éléments de réflexion ci-après.

Enfin, le laboratoire participera pleinement à l'animation scientifique (cours, séminaires) qui va se développer autour du projet PHYNUM.

Grands Thèmes et Projets

Les savoir-faire capitalisés au sein du laboratoire sont les suivants :

Mésoscopie :

Aujourd'hui on sait que la description classique du transport ne peut pas être appliquée aux métaux de dimensions réduites à basse température. En effet, dans ces métaux mésoscopiques, les électrons se propagent de façon cohérente 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 dépend crucialement du système en question. Nos activités de recherche sur le transport et le bruit thermoélectrique concernent les fils quantiques ainsi que les métaux désordonnés. Le but de cette recherche est de montrer comment les effets conjugués du désordre et des interactions se manifestent dans les coefficients de transport mesurables tels que la conductivité électrique ou thermique, ou encore le spectre du bruit.

Le comportement d'un métal mésoscopique supraconducteur peut être très différent du comportement d'un supraconducteur infini de type *bulk*. Nous étudions les propriétés thermodynamiques et de transport d'un petit grain supraconducteur. Nous nous intéressons également à la force d'appariement dans un nanograin supraconducteur. On s'attend à ce que la description habituelle du couplage électron-phonon change puisque la taille finie d'un petit grain mène à la quantification du spectre des électrons et des phonons. En outre, les effets de surface ne sont plus négligeables.

Finalement, on s'intéresse aux 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. On a pu mettre en évidence les états enchevêtrés dans un circuit comportant un bit quantique Josephson couplé à un résonateur supraconducteur.

Méthodes ab initio:

C'est une approche qui, à partir d'une description quantique des électrons et des hypothèses variationnelles comme la densité fonctionnelle, permet d'obtenir les propriétés de base de la matière condensée, telles que les structures électroniques, les énergies chimiques et mécaniques. L'efficacité de cette méthode vient d'être reconnue par la communauté scientifique par l'attribution du prix Nobel de Chimie à Walter Kohn. La partie algorithmique consistera à mettre au point des méthodes de calcul « d'ordre N » permettant d'aborder l'étude de systèmes de taille de quelques centaines d'atomes. Un effort doit être fait aussi dans le traitement des corrélations. Quant aux matériaux, il est envisagé d'étudier la croissance CVD (Chemical Vapor Deposition) de Si et SiC, la structure de liquides surfondus ainsi que les contraintes mécaniques dans les films épitaxiés. La problématique du transport aux interfaces hétérogènes sera également abordée.

Ondes en milieu complexe :

Ces dernières années, un renouveau des concepts de base de la diffusion multiple des ondes, aussi bien électromagnétiques qu'ultrasonores ou sismiques, a été initié et développé au laboratoire avec un esprit très interdisciplinaire: il s'agit de l'étude du transfert radiatif dans des systèmes hétérogènes et mésoscopiques, combinant le désordre de la répartition des diffuseurs avec l'anisotropie, la rotation de Faraday et éventuellement les non-linéarités. Au-delà des valeurs moyennes des champs ou des intensités diffuses, les corrélations de courte et de longue portée ont été calculées en fonction du champ magnétique pour les milieux magnéto-optiques, de la fréquence des ondes, des non-linéarités. Les projets concernent les capacités à transférer l'information par des ondes dans ces systèmes fortement diffusants, les instabilités provenant des non-linéarités, la localisation forte en régime dynamique, la magnéto-chiralité des milieux désordonnés et tout un ensemble d'études du comportement diffus des ondes sismiques en régime « mésoscopique ».

Un thème fédérateur : Les Nanosciences

En amont de toutes les applications ou nanotechnologies, les nanosciences concernent l'ensemble des recherches sur les propriétés originales d'objets de petite taille. Ces recherches ont connues dernières années un grand essor, directement connecté à l'effort industriel de la miniaturisation des composants élémentaires de l'électronique, l'un des défis majeurs étant le développement de circuits intégrés plus petits et plus performants. Les nanosciences permettent d'envisager une explosion d'applications nouvelles, notamment dans les technologies de l'information et de la communication, où la réduction de la taille des composants (à des dimensions submicroniques) aboutit déjà à des phénomènes nouveaux (effets quantiques, blocage de Coulomb).

On peut aussi s'attendre à voir apparaître des instruments et des applications reposant sur des principes radicalement nouveaux dans des disciplines telles que la chimie, la physique et l'informatique. A l'aide de nouvelles techniques comme la microscopie à champ proche, les nanosciences d'aujourd'hui permettent de plus en plus une approche du type "bottom up", c'est-à-dire une approche basée sur l'assemblage des nano-objets individuels (des atomes ou des molécules) pour en former des nano-composants dotés de certaines propriétés spécifiques (fil quantique semiconducteur, nanocircuit supraconducteur, puits quantique magnétique). Il est évident qu'une telle approche nous mène à de nouvelles questions au niveau de la théorie et de la modélisation. Au cœur de la théorie quantique résident les principes très sophistiqués de la mesure de la cohérence. Il est fort possible que grâce aux expériences nouvelles en nanosciences,

de nouveaux défis théoriques apparaissent sur le comportement cohérent de plusieurs particules, l'enchevêtrement de leurs fonctions d'onde et leur décohérence.

Aujourd'hui, plusieurs laboratoires grenoblois ont une activité scientifique importante dans le domaine des nanosciences, notamment au niveau expérimental. 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 nouvelles technologies comme l'électronique moléculaire (nanotubes de carbone), les structures hybrides (jonction métal-matériau ferromagnétique), ou encore l'information quantique (systèmes photoniques, nanocircuits supraconducteurs). Etant donné cette activité expérimentale importante, il est fort souhaitable que la recherche théorique dans ce domaine se développe en parallèle au sein du LPMMC.

Etant donné le savoir-faire spécifique des trois équipes de notre laboratoire, le LPMMC est tout à fait apte à aborder des questions pertinentes dans le domaine des nanosciences. Par exemple des questions se posent au niveau de la chimie (Pasturel, Peyla) au sujet des lois qui régissent les processus de positionnement d'un objet individuel sur une surface à l'échelle nanométrique ainsi que l'assemblage de plusieurs nano-objets (interactions, dynamique) afin d'en former un nano-composant. Pour que ce composant ait une fonctionnalité prérequisée, il faut comprendre comment l'information (le plus souvent d'origine électronique ou photonique) est transférée entre les nano-objets constituant le composant. Il faut alors non seulement comprendre les propriétés physiques de transport (Hekking, van Tiggelen), mais aussi connaître la relation entre les propriétés de transport et la capacité à transmettre l'information (Maynard, Skipetrov).

La Physique Théorique à Grenoble : le rôle du LPMMC

Grenoble est un centre de recherche important en physique de la matière condensée et ses interfaces avec la chimie, la biologie et les géosciences. L'approche théorique et numérique y est indispensable pour stimuler les réflexions prospectives et interdisciplinaires dans un environnement très majoritaire d'expérimentateurs. En effet les théoriciens et numériciens doivent analyser les mesures, mais aussi prédire des comportements nouveaux et encourager les transferts conceptuels dans des champs disciplinaires connexes. C'est probablement la tâche principale à mener dans les prochaines années sur les thèmes très actuels des nanosciences et des interfaces disciplinaires. Quelle est la bonne proportion de théoriciens dans une communauté de physiciens? Il est difficile de répondre à cette question si ce n'est que cette proportion a toujours été très faible à Grenoble. Si l'existence d'un groupe de théoriciens à l'ILL et à l'ESRF, pour la plupart non permanents, a joué un rôle important d'animation, la création et la consolidation du LPMMC a été la première tentative de stabiliser un groupe de théoriciens dans une unité pérenne.

Les laboratoires de physique théorique de trop grande taille – effectif supérieur à 15 – ont de grandes difficultés à maintenir une interaction forte avec les pratiques expérimentales. On y observe fréquemment une tendance à la formalisation qui freine les synergies nécessaires aux avancées dans les problématiques actuelles. Nous pensons que la taille actuelle du LPMMC est proche d'une taille optimale pour mener sa mission et nous ne souhaitons pas regrouper l'ensemble des théoriciens grenoblois qui développent leur recherche en petite équipe au sein des autres laboratoires grenoblois. Au contraire 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. En particulier nous soutenons le projet de création d'un espace pour accueillir des visiteurs au cœur du polygone scientifique. Le LPMMC étant fortement cosmopolite, nous nous sentons une vocation particulière pour cet accueil comme « local contact » de la théorie.

Du fait de ses recrutements récents (+3 CR en 2001), le laboratoire rencontre une difficulté dans son implantation à la Maison des Magistères. Les locaux actuels (300 m2) sont trop exigus pour les 10 permanents avec leur cortège de doctorants, de postdocs et de stagiaires. La surface optimale pour ce petit laboratoire serait plutôt de 400 m2. Si l'accueil des visiteurs devait se faire dans 100 m2 environ, à proximité du LPMMC, c'est une surface totale de 500 m2 qu'il faudrait prévoir pour une réimplantation du LPMMC. Cette implantation doit se réaliser sur le site du polygone CNRS, immergée au cœur des laboratoires de la matière condensée. Nous souhaitons que cette proposition soit évoquée à la Direction du CNRS, avant l'attribution des nouvelles surfaces construites dans le cadre de la surélévation du bâtiment abritant le LEMD.

Détails des projets scientifiques

A. Equipe Ondes en Milieux Complexes

Responsable : Bart VAN TIGGELEN

Frédéric FAURE :

Nouvelle collaboration qui démarre avec Stéphane DeBièvre (Université de Lille) et Stéphane NonenMacher (Service phys. théorique Saclay) sur le thème du chaos quantique. Préparation d'un article sur la localisation de fonctions d'ondes dans une dynamique chaotique.

Collaboration avec Frank Hekking (LPM2C) sur les phénomènes de décohérence dans les nanocircuits supraconducteurs, voir rubrique de l'équipe *Théorie des Systèmes Mésooscopiques* ci-dessous. 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. Encadrement d'un étudiant de DEA puis thèse en 2001-02 sur le sujet "Fluctuations de point zéro et décohérence à température nulle dans un modèle simple". Contact régulier avec des expérimentateurs du CRTBT Grenoble (Olivier Buisson, P. Lafarge, Laurent Levy) à travers un groupe de travail quasi-hebdomadaire sur les jonctions Josephson.

Continuation de la collaboration avec Boris Zhilkinskii (Université de Dunkerque) sur les propriétés topologiques dans le problème à N corps en mécanique quantique, en particulier dans les molécules.

Contact régulier, groupe de travail et séminaires, avec l'équipe de physique mathématique de l'Institut Fourier, Grenoble.

Roger MAYNARD/ Sergey SKIPETROV

TRANSFERT DE L'INFORMATION

Plusieurs domaines de recherche font appel aux concepts de propagation des ondes en milieu désordonné en vue de transférer de l'information:

- l'imagerie d'objets enfouis dans des milieux opaques et diffus en médecine ou en détection sous-marine
- la téléphonie « portable » en milieu urbain ou en milieu aquatique turbide
- une nouvelle génération d'architecture pour les dispositifs de la nano-électronique, où les composants de base s'assemblent spontanément par auto organisation sans ordre défini a priori
- les systèmes vivants

Une situation commune à ces milieux complexes est la suivante : pour un ensemble de sources et de détecteurs enfouis dans le milieu désordonné et émettant et captant des signaux sous formes d'ondes codées (par modulation ou tout autre procédé), quelle est la capacité maximale à transmettre l'information (et éventuellement la traiter –signal-processing – comme dans la nano-électronique) dans ce milieu où règne la diffusion multiple ? Pour caractériser cette propriété de transfert, la capacité théorique de Shannon a été généralisée récemment sous la forme suivante :

$$C = \max_Q \langle \log \det (1 + \mathbf{G} \cdot \mathbf{Q} \cdot \mathbf{G}^*) \rangle$$

Où G est le propagateur en milieu diffus, Q la corrélation éventuelle des signaux émis par les sources, \det le déterminant à calculer sur les détecteurs et $\langle \dots \rangle$ une moyenne à prendre sur le désordre. Le calcul de cette capacité théorique est difficile, en particulier du fait des corrélations entre les ondes diffuses, qui peuvent s'étendre à longue distance (corrélations C_2 , C_3 et C_0). Une analyse très simplifiée, utilisant la corrélation de courte portée C_1 , vient d'être présentée dans des numéros récents de *Science* (Janvier 2000) et *Physics Today* (Septembre 2001) : avec plusieurs antennes et plusieurs détecteurs, le désordre du milieu de propagation offre des avantages par rapport à la situation homogène dans la mesure où les limitations de diffraction peuvent être surmontées : La capacité de Shannon en est augmentée. Nous nous proposons de collaborer avec le groupe de Mathias Fink au Laboratoire d'Ondes et Acoustiques de l'ESPCI, qui entreprend une étude expérimentale de ces phénomènes et nous développerons les analyse théoriques et numériques correspondantes. Nous pensons que ce champ de recherche, inspiré par des situations très concrètes, mérite aujourd'hui un effort important de théorisation.

NON LINEARITE ET DESORDRE

Nous avons prévu qu'au-delà d'une valeur-seuil du paramètre « intensité fois la taille » de l'échantillon, les « speckle » d'intensités multiples diffusées deviennent instables. Ces « tavelures » se mettent à fluctuer aléatoirement au cours du temps comme si une source d'irréversibilité était présente dans le système. C'est une authentique brisure de réversibilité temporelle dans un système, a priori invariant par renversement du temps. L'importance de cette bifurcation mérite une étude expérimentale détaillée qui est entreprise dans le groupe de Claude Boccara au laboratoire d'Optique Physique de l'ESPCI. Au-delà du seuil, dans le régime prédit d'irréversibilité, comment caractériser ce nouveau régime ? Quelle est la route vers le chaos pour ce type de bifurcation particulier ? Nous prévoyons développer des analyses théoriques et numériques pour caractériser ce nouveau régime.

STATISTIQUE D'INTENSITE DANS UN MILIEU DESORDONNE

En collaboration avec Frank Scheffold au Laboratoire de Physique de la Matière Molle (Université de Fribourg, Suisse) nous allons effectuer une étude à la fois théorique et expérimentale de la loi de distribution d'intensité $P(I)$ d'une onde diffusée dans un milieu désordonné (expérimentalement, le milieu désordonné et représenté par une suspension de petites particules de latex ou téflon dans l'eau). La loi $P(I)$ sera étudiée pour des échantillons en forme de « guide d'ondes » ou de « tranche », dans le régime d'intensité extrêmement faible (« photocount statistics »), et en fonction du mouvement des diffuseurs dans le milieu.

SPECTROSCOPIE OPTIQUE DANS LES MOUSSES EN REGIME DE DIFFUSION MULTIPLE

En collaboration avec Reinhard Hohler et Sylvie Cohen-Addad au Laboratoire des Matériaux Divisés et des Interfaces (Université Marne-la-Vallée) nous allons étudier la diffusion multiple des ondes optiques dans les mousses. L'étude théorique sera complétée par les simulations numériques Monte Carlo ainsi que par des expériences. En particulier, nous envisageons d'effectuer un calcul du libre parcours moyen de photon dans une mousse en fonction de l'indice de réfraction de la mousse, de la fraction volumique de liquide, et de la taille moyenne de bulles de gaz. La comparaison de ce calcul avec les résultats des simulations numériques et des mesures expérimentales nous permettra d'établir une relation entre les quantités mesurées (coefficient de transmission ou réflexion) et les paramètres microscopiques de la mousse (taille des bulles, l'indice de réfraction, etc.). Ces résultats permettront éventuellement de fonder les bases de la spectroscopie optique des mousses en régime de diffusion multiple.

Bart VAN TIGGELEN

MESOSCOPIE DES ONDES SISMIQUES

(projet ACI du ministère), en collaboration avec le LGIT-Grenoble : Michel CAMPILLO (UJF), Ludovic MARGERIN (CNRS).

Coda Q.

Il est important de comprendre la valeur de la Coda Q, et son comportement en fonction de la fréquence à partir des paramètres régionaux (la profondeur du Moho en particulier), en traitant la cohérence dans le processus de fuite. On a prévu de calculer la fuite totale à partir des modes à perte de la croûte, en faisant appel au principe d'équipartition. Une application importante est de quantifier la part relative des processus élastiques et inélastiques, toujours en vue de caractériser les matériaux.

Rotation différentielle

Il existe des indications que le noyau interne est désordonné (Vidale et Earle, Nature **404**, 273, 2000). Récemment, les géophysiciens ont envisagé la possibilité d'une rotation différentielle de la graine terrestre par rapport à la Terre (Song et Richards, Nature **382**, 221, 1996 ; Vidale et Earle, Nature **405**, 445, 2000) à partir des ondes diffusées par le noyau. Cette rotation, si elle existait, jouerait un rôle très important dans la compréhension du champ magnétique terrestre. Cette rotation plus rapide de la graine a été vue par des mesures de direction d'arrivée des ondes PkiKP (diffractées par l'interface graine – noyau externe).

Un défi est d'inverser les données d'ondes sismiques diffusées enregistrées par le Réseau Sismique Mondial (G.S.N.) et de quantifier les dimensions caractéristiques des hétérogénéités présentes dans le manteau et le noyau terrestre, qui sont pour l'instant très mal connues. Nous disposons également de deux enregistrements (aux Etats-Unis) d'explosions nucléaires russes qui ont eu lieu au même endroit à 3 ans d'intervalle. On voudrait estimer l'hétérogénéité du noyau interne à partir de la fonction de corrélation des ondes sismiques PKiKP diffusées (= approche mésoscopique) et, si possible, sa rotation différentielle.

Rétrodiffusion cohérente

On voudrait monter des expériences de rétro-diffusion cohérente en vraie grandeur. L'enjeu important de cette expérience est de pouvoir mesurer *directement* l'hétérogénéité de la croûte, quantifiée par son libre parcours moyen. Le premier essai (avec des explosifs) a eu lieu en Chartreuse en septembre 2001. L'ACI nous permettra l'achat d'un équipement instrumental spécifique qui pourra être basé sur un système d'acquisition sismique haute résolution.

La fonction de Green à partir de la corrélation du champ.

En collaborant avec le professeur Weaver (Urbana-Champaign, USA) on s'est rendu compte qu'il existe peut-être un moyen très puissant (et très mésoscopique) d'obtenir de l'information à partir des corrélations des ondes diffuses. Pour une cavité chaotique, Weaver a montré que la fonction de corrélation du champ élastique est égale à la fonction de Green du système (Weaver et Lobkis, Phys. Rev. Lett. **87**, 134301, 2001). Il reste à voir si ce théorème s'applique pour la croûte et également comment faire la moyenne statistique ? (En moyennant peut-être sur différentes sources). La fonction de Green contient *toute* l'information sur la structure du milieu. Quelques résultats encourageants ont été obtenus – avec des données de Mexique dont le comportement diffus s'est déjà révélé en étudiant l'équipartition (Hennino, Trégourès, Campillo, Margerin, Van Tiggelen, et Weaver, Phys. Rev. Lett. **89** 3447, 2001). Un défi théorique existe à savoir quand la méthode s'applique exactement (stage DEA de Eric Larose de l'ENS Lyon, 2001 ; Larose rejoindra l'équipe en 2002 pour une thèse).

MAGNETO-CHIRALITE DES SYSTEMES DESORDONNES

(Projet de thèse : Felipe PINHEIRO, soutenance prévue en octobre 2003) ; collaboration avec l'équipe expérimentale du Dr. Geert RIKKEN (MPI-Grenoble) .

La chiralité fait appel à une brisure de la symétrie miroir du milieu. En milieu homogène, la chiralité induit le pouvoir rotatoire. Qu'est-ce qui se passe en milieu désordonné? En principe, un milieu désordonné est toujours chiral, car il n'est pas équivalent à son image miroir, même pas à une rotation près. Qu'est-ce que cela entraîne pour la lumière multiple diffusée? Une phase de Berry? (Notons le travail original sur la phase de Berry en diffusion multiple de la lumière par A.G. Maggs à l'ESPCI-Paris: Phys.Rev.Lett. **87**, 253901, 2001).

Une autre réflexion porte sur la magnéto-chiralité. C'est l'effet croisé de la rotation Faraday et du pouvoir rotatoire, qui fait donc appel à deux symétries brisées. Actuellement, cet effet est étudié au Laboratoire des Champs Magnétiques Intenses de Grenoble (G. Rikken et R. Raupach, Nature **390**, 493, 1997). Il a une analogie remarquable avec l'effet Aharonov-Bohm en mécanique quantique. Est-ce que l'effet Sharvin-Sharvin et les courants persistants existent pour les photons dans un milieu magnéto-chiral? Ceci est un projet de thèse en cours (Felipe PINHEIRO, soutenu par le CNPq Brésilien jusqu'à 2004). Ce projet est également soutenu numériquement par une collaboration avec l'équipe du professeur Orłowski à Varsovie (contrat POLONIUM du ministère des affaires étrangères).

TRANSFERT D'INFORMATION A TRAVERS D'UN MILIEU DESORDONNE (collaboration avec SKIPETROV et MAYNARD).

La propagation des micro-ondes dans une ville fait appel à la diffusion multiple, et évidemment sa compréhension pourrait optimiser les communications des téléphones portables. Une étude aux Bell-Labs (New Jersey, USA) a spéculé que la *limite de Shannon* pour le nombre maximal de bits transmissibles par unité de temps et par gamme de fréquence, pourrait être dépassée en diffusion multiple (Simon *etal*, Physics Today, septembre 2001). Cette spéculation intéressante mérite une étude plus profonde. Le langage « information » est – à tort - peu utilisé dans la communauté de la diffusion multiple des ondes.

LOCALISATION FORTE D'ANDERSON :

Collaboration avec les équipes expérimentales à Queens College (Prof. GENACK) et Amsterdam (Prof. LAGENDIJK), soutenue par un thésard payé par le FOM néerlandais (projet approuvé).

Dynamique

Après 40 ans de localisation forte, il n'existe *aucune* théorie capable de décrire la dynamique (la propagation temporelle) en régime de localisation forte. La nouvelle théorie des systèmes ouverts (Van Tiggelen, Lagendijk et Wiersma, Phys. Rev. Lett. **84**, 4341, 2000) a le potentiel de pouvoir être généralisée pour la dynamique. Les premières expériences ont déjà été effectuées (Chabanov et Genack, Phys. Rev. Lett. **87**, 233903, 2001). Ceci est un projet de thèse qui sera soutenu par le FOM, l'équivalent néerlandais du CNRS (projet approuvé en décembre 2001, poste vacante ; responsable Ad Lagendijk), la communauté européenne (FP5), et le NSF (responsable : Azriel Genack).

Un deuxième défi sera de confronter la théorie stationnaire aux expériences de rétrodiffusion cohérente et de transmission (Schuurmans, Lagendijk *etal*, Phys. Rev. Lett. **83**, 2183, 1999 ; Chabanov et Genack, Phys. Rev. Lett. **87**, 153901, 2001).

Localisation forte & Ondes de matière.

L'observation de la condensation de Bose-Einstein dans des gaz en faible interaction a donné lieu au Prix Nobel 2001 de physique. L'observation fait appel à l'interaction entre des atomes et des photons. Il est relativement facile de démontrer que le critère de la condensation est équivalent au critère de Ioffe-Regel pour la localisation forte des photons résonnants à la transition atomique. Est-ce que la lumière se localise dans les condensats? La question a été étudiée récemment (2000) par E. MANDONNET au LKB-Paris (*Etude Théorique d'un Gaz de Bose Ultra-froid : Diffusion et Localisation de la Lumière*, directeurs de thèse : J. Dalibard et A. Aspect). On pourrait même poser la question inverse: est-ce que les atomes cohérents peuvent être localisés dans un milieu optique aléatoire (un speckle 3D)? C'est la mélasse optique qui ne fait plus de différence entre les atomes et les photons. Une réflexion avancée existe déjà grâce à la collaboration avec le Laboratoire Ondes et Désordre/CNRS (Nice, responsables : Christian MINIATURA et Robin KAISER). En février 2001 un colloque « *Physique Ondulatoire avec des Gaz d'Atomes Froids* » a été organisé à Grasse (responsables : Bart VAN TIGGELEN, Christian MINIATURA , Nice et Dominique DELANDE, LKB Paris, soutenu par le GDR PRIMA et le ministère de la recherche) où ce sujet a été largement discuté.

DIFFUSION MULTIPLE ET DECOHERENCE DES PHOTONS QUANTIQUES :

Il n'existe actuellement *aucune théorie* qui décrit la diffusion multiple des vrais photons, c'est-à-dire d'un champ électromagnétique quantifié avec la cohérence « hors diagonale ». Est-ce qu'on peut observer la rétrodiffusion cohérente ou les fluctuations universelles avec un *seul* photon? La mésoscopie à un seul photon ? Et quelle est la décohérence des photons (due à l'émission spontanée) en milieu désordonné? Des grandes questions ouvertes, difficiles mais plus urgentes que jamais car les premières expériences ne vont pas tarder....Je suis membre du GdR 2285 « *Information et Communication Quantique* » (responsable : Jean-Philippe POIZAT, Orsay), qui a été créé en 2000, et qui fournira le contexte scientifique de ce nouveau projet.

B. Equipe Auto-organisation de la Matière

Responsable : Alain PASTUREL

L'élaboration de nos perspectives de recherche reflète la volonté de s'orienter vers des thèmes de recherche qui doivent valoriser les approches numériques tout en assurant un développement permanent de ces méthodes. Quelques grands axes sont d'ores et déjà bien définis et sont présentés ci-après. Peut-être faut-il souligner l'étude entreprise qui doit permettre de coupler des calculs atomistiques à la théorie de l'élasticité linéaire dans l'analyse des contraintes générées par des atomes adsorbés sur un substrat.

Olivier LEBACQ ET ALAIN PASTUREL :

DEVELOPPEMENT DES METHODES DE CALCUL D'ORDRE N

Les calculs de structure électronique de systèmes à grande taille pose de sérieux problèmes de ressources informatiques au niveau du temps CPU et de la taille mémoire. La difficulté principale vient du fait que la complexité du calcul varie généralement beaucoup plus vite que le nombre d'électrons N dans le système. Ce comportement est N^3 pour les méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité voire un exposant plus élevé pour les méthodes de type Hartree-Fock avec interactions de configurations. Depuis quelques années, une nouvelle classe de méthodes est en développement. Ces approches visent à obtenir une évolution linéaire du temps de calcul avec le nombre d'électrons. Cette nouvelle classe de méthodes « d'ordre N » doit permettre d'aborder efficacement la structure électronique des systèmes de grande taille. Un programme d'ordre N est en cours de réalisation en collaboration avec l'ENS Lyon (Sautet et Artacho). Un travail méthodologique est effectué pour adapter ce type de programme aux besoins des applications. Un effort particulier porte sur la dynamique moléculaire. Pour notre part, nous sommes en train de

réaliser le premier calcul pour du silicium liquide surfondu. Cette collaboration avec d'autres équipes va nous permettre d'obtenir un programme de très bonne qualité et aussi de défendre des projets de méso-informatique (réalisé à Lyon et en cours de réalisation à Grenoble).

DEVELOPPEMENT D'HAMILTONIEN-MODELES POUR LA SIMULATION DES MATERIAUX

La simulation à l'échelle atomique des métaux et alliages nécessite la modélisation de l'interaction entre les atomes sous la forme d'un potentiel énergétique. Longtemps exprimée sous forme de fonctions ou potentiels empiriques, cette interaction interatomique est désormais représentée avantageusement par les méthodes ab-initio, qui prédisent le comportement énergétique des matériaux par la résolution des équations de la mécanique quantique (théorie de la fonctionnelle de la densité). Les potentiels empiriques autorisent des simulations sur quelques millions d'atomes, mais utilisent des paramètres ajustables peu spécifiques à un élément donné ne permettant généralement que l'étude quantitative des tendances de matériaux génériques. A l'opposé, le pouvoir de prédiction et l'efficacité des méthodes ab-initio n'est plus à démontrer. Elles restent cependant encore limitées par la lourdeur de leur mise en oeuvre numérique (temps de calcul, mémoire informatique utilisée très élevée).

L'hamiltonien de liaisons fortes constitue le formalisme le plus simple pour décrire le comportement énergétique des matériaux dans le cadre de la mécanique quantique. Il extrait l'essentiel de la structure électronique tout en évitant la lourdeur des calculs ab-initio (base d'orbitales réduite). La méthode des liaisons fortes apparaît ainsi comme un excellent compromis entre les méthodes ab-initio et les potentiels empiriques. Longtemps pratiquée sous une forme simplifiée qui consistait à ne retenir que les états localisés dans l'écriture de l'hamiltonien, elle bénéficie aujourd'hui d'un cadre conceptuel élargi grâce au lien qu'elle entretient avec les méthodes ab-initio, et sur lequel nous pouvons désormais nous appuyer pour déterminer les paramètres qui la constituent.

De nombreuses tentatives de dérivation d'hamiltoniens de liaisons fortes ont déjà vu le jour ces dernières années. Elles procédaient pour la plupart en un ajustement massif de paramètres sur nombre de propriétés physiques calculées par les méthodes ab-initio (structure de bandes, différence d'énergie structurale), rendant souvent incertain la transférabilité ou la fiabilité du modèle sur d'autres propriétés non utilisées lors de la procédure d'ajustement. L'originalité de ce projet tient dans le développement d'un hamiltonien de base localisée de type Tight-Binding Linearized Muffin-Tin Orbitals (TB-LMTO). L'idée est de conserver l'écriture formelle de l'hamiltonien TB-LMTO, dérivé de manière exacte à partir de calculs ab-initio auto-cohérents, tout en reformulant la dépendance des paramètres TB-LMTO de centrage et de largeur de bande, ainsi que des constantes de structure, en fonction d'un nouveau paramètre local, remplaçant le rayon de Wigner-Seitz moyen conventionnellement utilisé dans le modèle. La détermination et la formulation simple de ce paramètre en fonction des distances interatomiques permettra une ré-écriture totalement analytique de l'hamiltonien TB-LMTO, autorisant d'envisager pour la première fois des études de relaxation de structure et de dynamique moléculaire dans le cadre de cette technique quantitative. Outre ce dernier aspect, la force de la méthode réside dans l'obtention immédiate des paramètres de liaisons fortes par une série de calculs ab-initio préliminaires rapides, qui élimine le choix hasardeux de fonctions de représentation pour l'expression analytique des paramètres, ainsi que leur ajustement. Enfin, l'introduction d'un paramètre local en lieu et place du rayon de Wigner-Seitz moyen entend palier les déficiences admises du modèle lorsque la symétrie du système est abaissée.

Ce type de potentiel rapide et quantitatif trouverait rapidement de nombreuses applications tant dans le domaine de la métallurgie (étude de la dynamique des défauts étendus tels que les joints de grain et dislocations) que dans celui des nouveaux matériaux (stabilité et dynamique des interfaces métal/oxyde, nano-matériaux, ...). Le couplage de ce type de potentiel avec une méthode d'ordre N pourrait être envisagé de manière à réduire le coût en temps de calcul. Enfin, les phénomènes de transport électronique dépendant du spin dans les hétérostructures pourraient être abordés sous la forme d'une collaboration (montage du potentiel sur un code de transport existant fonctionnant dans un cadre TB-LMTO).

CROISSANCE CVD DE SiC (avec Philippe PEYLA)

La croissance d'un film est souvent gouvernée par la cinétique et non par la thermodynamique. Ainsi la connaissance de la cinétique comme la diffusion à travers les terrasses et les marches est essentielle pour comprendre la morphologie et la qualité de la croissance. Jusqu'à maintenant un grand nombre de calculs de diffusion atomique en surface ont été faits dans le cadre de méthodes semi-empiriques. Comme le mécanisme gouvernant la rupture ou la création de la liaison chimique est absent dans ces approches, il est indispensable de faire appel aux calculs ab initio pour mettre en place un outil permettant de comprendre quels sont les principaux facteurs qui entrent en jeu dans la croissance. Pour l'étude plus spécifique de la croissance des dépôts de SiC, les calculs ab initio seront couplés à des simulations de type Monte Carlo cinétique (collaboration A. Dollet et L. Magaud) dans le but d'analyser les phénomènes qui sont à l'origine des changements de structure observés lors de la croissance de certains polytypes de SiC (transition 4H-3C par exemple). Nous souhaitons aussi étudier l'effet de dopage par l'azote. Pour obtenir les informations expérimentales, une collaboration avec l'INPG (Pons, Madar) et le CEA-Leti a été mise en place. Un projet de structure nationale est aussi envisagé. Il sera discuté au cours d'une école thématique organisée cet été.

METALLURGIE D'ALLIAGE

Toute la problématique transitions de phases, défauts, propriétés mécaniques va perdurer dans un programme COST qui regroupe à la fois des expérimentateurs et des thermodynamiciens phénoménologiques. L'ambition est de coupler les calculs ab initio à des techniques de type CALPHAD (calculation of phase diagram) afin d'obtenir une compréhension suffisamment quantitative pour des applications industrielles. Ce seront les alliages à base d'aluminium qui seront principalement étudiés dans un enjeu industriel pour l'aéronautique.

STRUCTURE DE LIQUIDES SURFONDUS

Depuis les travaux de Frank, il est généralement admis qu'un liquide monoatomique sous-refroidi a une propension à développer de l'ordre icosaédrique. Son apparition a été confirmée par des simulations utilisant un modèle de Lennard-Jones. Cependant pour des systèmes plus complexes comme les métaux dont les interactions ne peuvent être décrites par un modèle aussi simple, cette question est loin d'être résolue. Des premières observations expérimentales semblent montrer que le silicium et le zirconium subissent en surfusion une évolution de la structure qui ne correspond pas au modèle de Frank alors que le palladium surfondu développe un ordre icosaédrique significatif. Des premières simulations de dynamique moléculaire ab initio confirment les résultats pour le silicium et le palladium mais infirment les résultats obtenus pour le zirconium. Nous avons ainsi décidé d'intensifier nos investigations théoriques dans ce domaine avec une demande de détachement au CNRS de la part de N. Jakse (MC1 à l'université de Metz) et avec une collaboration plus soutenue avec le groupe expérimental de D. Price et ML. Saboungi.

MULTICOUCHES METALLIQUES ET HETEROSTRUCTURES

En collaboration avec O. Eriksson (Université d'Uppsala, Suède)

La thématique "multicouches métalliques", initiée sur le système Fe-V se poursuivra par l'étude ab initio des systèmes Co/Pt et Co/Au, qui présentent des propriétés remarquables d'ancrage de spin. L'effort sera porté sur la détermination de la structure d'interface, et sur le rôle que celle-ci peut jouer sur la valeur de l'énergie d'anisotropie magnétocristalline.

Parmi les différents domaines de la magnéto-électronique, le transport d'électrons dépendant du spin dans les hétérostructures combinant des matériaux ferromagnétiques et des oxydes ou des matériaux semi-conducteurs constitue actuellement un sujet d'un intérêt majeur (exploitation de leur

magnétorésistance géante pour l'élaboration de transistors ou de RAM magnéto-résistives). Une compréhension exacte des phénomènes de transport mis en jeu dans ces matériaux nécessite la connaissance réaliste de la structure électronique des matériaux ferromagnétiques, des semi-conducteurs et des oxydes, et plus particulièrement des interfaces qui les séparent. Les calculs *ab-initio* apporteront nombre de réponses sur la structure et la connaissance de ces interfaces. Les effets d'alliage à l'interface ainsi que le problème de l'interdiffusion du métal dans le semi-conducteur ou l'oxyde reste à quantifier. Un métal en contact avec un semi-conducteur génère un certain nombre d'états électroniques à l'intérieur de la bande interdite. Ces nouveaux états influencent les propriétés de l'interface. Le point d'interrogation tient dans la portée de l'influence de ces états métalliques dans les couches semi-conductrices. Un calcul fiable et réaliste de ces propriétés nécessitera d'abord en premier lieu le problème de la reconstruction de ces surfaces : ont-ils une influence majeure sur le peuplement des électrons dans les deux canaux de spin? Finalement, l'étude de l'influence des défauts à l'interface pourrait être abordé.

Philippe PEYLA

MILIEUX VISCO-ELASTIQUES.

La plupart des matériaux biologiques ou organiques possèdent des propriétés visco-élastiques. L'étude des propriétés mécaniques de ce type de matériau permettrait de mieux comprendre le comportement de certains fluides complexes (non newtoniens) comme des corps biologiques par exemple en présence de contraintes extérieures (flux hydrodynamique ou étirement mécanique).

En s'appuyant sur notre expertise des milieux élastiques, en collaboration avec Chaouqi Misbah (CNRS) du Laboratoire de Spectrométrie Physique de Grenoble (UJF - CNRS), nous avons abordé l'étude des fluides complexes comme les gels et les milieux visco-élastiques. Une étude sur les équations constitutives (liant contraintes et déformations) est en cours ainsi que sur la formation d'instabilités mécaniques des gels soumis à une contrainte uniaxiale.

INTERACTION ELASTIQUE

La plupart des modèles traitant des contraintes mécaniques sont soit de type atomistique (calcul de type premiers principes, Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (TFD) ou Dynamique Moléculaire) soit issus des théories continues (essentiellement de l'élasticité linéaire). Chaque modèle étant confiné dans son domaine de longueur d'échelle : microscopiques pour les calculs atomistiques et macroscopiques pour les théories continues. Il serait intéressant de pouvoir établir un recouvrement d'échelle entre ces deux types d'approches.

C'est donc dans cet esprit que nous testons actuellement les limites de notre théorie d'interaction élastique aux petites échelles, c'est à dire quand les défauts sont à quelques mailles atomiques l'un de l'autre. Pour cela nous utilisons des méthodes numériques *ab-initio* de type DFT avec Alain Pasturel et Andrei Incze (actuellement en cours de thèse au LPMMC). Le matériau étudié est du graphite en présence d'oxygène, ce type de matériau (le graphite) présente en effet plusieurs avantages. La liaison C-C dans le plan basal est covalente, ce qui prévient contre tout effet de plasticité ou de forts déplacements d'atomes. Le plan basal de graphite est hexagonal et présente donc l'avantage d'être isotrope du point de vue mécanique. L'aspect bi dimensionnel du plan basal, permet également de traiter numériquement des distances de plusieurs mailles atomiques. L'ensemble de ces différents avantages permet d'envisager un recouvrement d'échelle entre les approches atomistiques et continues.

Une étude sur les interactions élastiques sur des défauts enterrés devrait également débiter prochainement en collaboration avec Chaouqi Misbah (Spectrométrie Physique - CNRS). L'auto-organisation de ses défauts sous la surface pourrait permettre de modéliser et de mieux comprendre la technique dite du *Smart Cut* développé à Grenoble par le LETI (CEA - Grenoble).

EQUATION D'EVOLUTION D'UN FRONT DE CROISSANCE AVEC SELECTION DE PENTE

En épitaxie par jets moléculaires, les matériaux croissent selon des directions cristallographiques privilégiées. On a ainsi une sélection de pente. Ce phénomène est assez courant en physique mais aussi en biologie comme dans l'ADN où des motifs en forme de zigzags se développent. Une expérience modèle sur de la cire a été réalisée à l'Université de Cornell par Eberhard Bodenschatz. Certains régimes présentent des zigzags, avec un mûrissement (coarsening) inhabituel. Nous voudrions comprendre la dynamique des fronts de croissance qui développent ce type de patterns en forme de zigzags c'est à dire où le front possède une pente préférentielle.

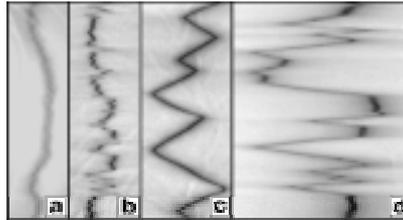


Figure 10 Expérience de formation de rift avec des plaques de cire. Le rift présente différentes formes en fonction de la vitesse d'étirement de la cire. a) 35 microns/sec b) 85 microns/sec c) 177 microns/sec d) 709 microns/sec. Rolf Ragnarsson et al, Physical Review Letters **76**, 3456 (1996).

En collaboration avec Martin Grant et Norberto Majlis de l'Université McGill de Montréal, Canada nous avons élaboré un modèle variationnel qui est étudié par la technique du groupe de renormalisation ainsi que par des simulations numériques afin d'en extraire les exposants dynamiques.

ORGANISATION D'UNE ECOLE D'HIVER AUX HOUCHES EN FEVRIER 2003

En collaboration avec Chouqi Misbah et Christiane Caroli (GPS - CNRS) nous organisons une école d'hiver aux Houches: "Elasticité aux différentes Echelles". Cette école devrait permettre de regrouper les différents champs de recherche sur les milieux élastiques (linéaires ou non-linéaires), les fluides complexes (gels, matériaux visco-élastiques et milieux granulaires) et la friction. Ces phénomènes très courants, interviennent à des échelles très différentes et dans des disciplines souvent cloisonnées les unes par rapport aux autres. Nous voudrions, par le biais de cette école pluridisciplinaire, permettre un apprentissage mutuel des techniques de modélisation récentes utilisées dans différents domaines.

C. Equipe *Théorie des Systèmes Mésoscopiques*

Responsable : Frank HEKKING

Frank HEKKING

TRANSPORT THERMOELECTRIQUE DANS DES SYSTEMES MESOSCOPIQUES

Fils quantiques

Nos calculs précédents ont montré l'existence d'une différence prononcée entre le transport de charge et le transport d'énergie dans un fil quantique avec interactions entre électrons. Nous souhaitons

étudier d'autres conséquences importantes de cette différence, comme par exemple le comportement du pouvoir thermoélectrique, qui est essentiellement une mesure de la corrélation entre le courant de charge et celui d'énergie. Il faut remarquer que le pouvoir thermoélectrique se mesure relativement facilement. Il fournira donc un nouvel outil permettant l'étude des interactions.

Nos résultats ont été obtenus à l'aide d'une approche de diffusion pour les excitations de basse énergie dans un fil quantique. Ce type de calcul montre une analogie avec l'approche de diffusion pour le transport électrique dans des conducteurs mésoscopiques en l'absence d'interactions. Il serait intéressant d'analyser cette analogie avec plus de détails. Par exemple, on pourrait étudier le bruit quantique du courant thermique. Le bruit quantique contient une information sur la statistique des particules portant le courant qui sont, dans le cas du courant thermique dans un fil quantique, des *bosons*.

Métaux désordonnés

Le rôle non-trivial des interactions Coulombiennes dans les systèmes métalliques désordonnés a été étudié par Altshuler *et al.*. Le fait que les interactions ne mènent pas purement à une ré-normalisation des paramètres spectraux est relié à la conjugaison des corrélations électroniques et de la propagation cohérente des électrons. Entre deux interactions, les électrons diffusent de façon cohérente pendant un temps qui est plus court que le temps de déphasage, mais plus long que l'inverse de l'énergie de Fermi. Cela donne lieu à des interférences constructives qui renormalisent la constante d'interaction de sorte qu'elle devient dépendante de l'énergie. L'effet de cette renormalisation sur la conductivité électrique a été profondément étudié. Pour ce qui est les autres coefficients thermoélectriques, relativement peu est connu. Par exemple, la question de la validité de la loi de WF a été abordée par Castellani *et al.* ainsi que par Livanov *et al.* mais les conclusions de ces deux études sont contradictoires. En outre, jusqu'ici personne n'a développé une méthode unifiée afin de calculer tous les coefficients thermoélectriques.

Nous nous proposons d'étudier l'effet des interactions sur le pouvoir thermique ainsi que sur la conductivité thermique. Pour identifier et calculer ces coefficients de transport d'un conducteur mésoscopique, on a tout d'abord besoin d'une théorie de réponse linéaire aux perturbations thermoélectriques. Luttinger a développé une telle théorie et a calculé des fonctions de réponse locales à fréquence nulle. Cependant, cette théorie ne s'applique pas dans le cas d'un conducteur mésoscopique : pour tenir compte du caractère ondulatoire du transport, il nous faut une théorie non-locale à fréquence finie. En outre, il s'agit de reformuler l'approche de Luttinger, en utilisant des fonctions de réponse retardées.

Ces fonctions peuvent ensuite être calculées pour des systèmes électroniques désordonnés en présence d'interactions. D'abord, on suivra l'approche d'Altshuler et d'Aronov, c.-à-d. qu'une théorie perturbative à l'aide des diagrammes de Feynman sera utilisée. On pourra ainsi traiter la diffusion par des impuretés tout en tenant compte des interactions. On trouvera une conductivité et un pouvoir thermoélectriques qu'il faut comparer aux résultats obtenus à l'aide d'une approche conventionnelle (avec une équation de type cinétique) ainsi qu'aux résultats obtenus par Castellani et Livanov. Une telle comparaison devrait montrer comment les effets de type non liquide de Fermi se manifestent dans le transport pour un système désordonné avec des interactions Coulombiennes. Par exemple, comme dans le cas d'un fil quantique il pourrait y avoir une différence entre les excitations portant la charge et l'énergie, ce qui pourrait impliquer de différentes propriétés de localisation pour ces excitations.

L'approche perturbative sera ensuite étendue, en utilisant la technique développée par Kamenev et Andreev. Cette technique permet le traitement non-perturbatif des effets d'interaction Coulombiennes dans un système désordonné. La conductivité électrique a déjà été calculée tout en utilisant cette approche. Nous souhaitons calculer de la même façon les fonctions de corrélation correspondant à la conductivité et le pouvoir thermiques.

MARCHE DE SHAPIRO "FRACTIONNAIRE"

(avec F. PISTOLESI)

Récemment le groupe de B. Pannetier (P. Dubos, H. Courtois, B. Pannetier) au CRTBT-CNRS de Grenoble a réalisé une jonction SNS (avec des interfaces très propres) où la partie normale est assez longue pour éliminer le passage direct des paires de Cooper, mais assez courte pour garantir aux électrons de faire plusieurs aller-retours cohérents entre les deux supraconducteurs.

Le courant critique dans ce système est en bon accord avec la théorie basée sur les équations d'Usadel (cf. P. Dubos *et al.* cond-mat/0008146). La jonction montre de toute façon un comportement complètement inattendu pour ce qui concerne la conductivité hors équilibre ($I > I_c$) en présence d'une radiation. Dans la jonction Josephson classique on observe des marches dans la conductance lorsque le voltage est $2eV = n\hbar\omega$ (marches de Shapiro). On peut expliquer ces marches par le passage des paires de Cooper d'un supraconducteur à l'autre avec émission de n photons d'énergie $\hbar\omega$. Dans la jonction SNS en question on observe des marches également à des voltages fractionnaires de $\hbar\omega$: $2eV = n\hbar\omega/m$, ce qui n'a pas été expliqué pour l'instant de façon convaincante.

Nous nous proposons d'étudier ce problème spécifique, qui rentre dans le cadre de la réflexion d'Andreev multiple entre deux supraconducteurs. Une possibilité que nous voulons explorer est que les marches à fréquence fractionnaire soient dues au passage de plusieurs paires à la fois. Ce phénomène est observé dans les jonctions SNS et conduit effectivement à une augmentation du spectre de bruit de grenaille à des valeurs multiples de $2e$. Donc on peut s'attendre que à ce passage de m paires corresponde l'émission de n photons : $m 2eV = n\hbar\omega$, donc la présence de marches pour des tensions $V = n\hbar\omega/2em$. Nous envisageons d'utiliser la technique de Keldish pour traiter ce système qui est fortement hors équilibre.

Peter SCHUCK/Frank HEKKING

SUPRACONDUCTIVITE DANS DES SYSTEMES DE DIMENSION REDUITE

La transition supraconductrice est due à l'instabilité de Cooper : la mer de Fermi est instable vis à vis d'une interaction attractive entre électrons. L'origine microscopique d'une telle interaction est le couplage des électrons avec les phonons. Le mouvement oscillatoire des ions influence fortement l'écrantage dynamique des interactions Coulombiennes entre électrons, de telle manière que, pour certaines fréquences, cette interaction devient attractive.

Remarquablement, une étude systématique des effets de taille finie sur la force même d'appariement n'existe pas. Jusqu'ici, on a supposé que le mécanisme microscopique de la supraconductivité décrit ci-dessus s'applique également dans le cas d'un supraconducteur mésoscopique (couches minces, petits grains). Pourtant, il n'est pas évident que cette hypothèse soit correcte. Par exemple, l'effet de la quantification du spectre des phonons ainsi que l'effet des phonons de surface sur l'écrantage des interactions Coulombiennes dans un nanograin n'est pas connu.

Dans ce cadre il faut mentionner que la température critique de certaines couches minces ainsi que des grains supraconducteurs *augmente* si l'on diminue la taille du système. Des expériences récentes sur les nanotubes de carbone ont montré l'existence d'un effet de proximité anormal pour un nanotube suspendu connecté à deux électrodes supraconductrices ainsi que la présence de supraconductivité intrinsèque pour un tube suspendu connecté à des électrodes normales.

Dans un premier temps on étudiera l'influence des effets quantiques dus à la taille finie du système sur le comportement des électrons et des phonons pour des géométries réalistes (couche mince, grain cubique ou sphérique, nano-tube suspendu). Ensuite on pourra calculer le couplage électron-phonon. Il faut notamment développer une description réaliste afin de décrire l'écrantage dynamique des interactions Coulombiennes dans un système de dimension réduite. Cela nous donnera en principe la constante de couplage qui détermine les propriétés supraconductrices comme par exemple la température critique en fonction de la taille et la géométrie précise du système.

Temps de décohérence

L'évolution dans le temps de tout système quantique couplé à l'extérieur est caractérisée par le phénomène de la décohérence. En effet, dû aux transitions induites par l'environnement, l'état quantique pur du système devient un mélange statistique. Une source importante de décohérence dans les nanocircuits supraconducteurs est constituée par le bruit associé aux circuits électriques couplés au système quantique afin de le manipuler ou de le mesurer. Une autre source (peu contrôlable) de décohérence est le bruit en $1/f$ induit par les fluctuations des impuretés chargées dans le substrat.

Afin de minimaliser l'effet de ces sources une connaissance théorique détaillée des fréquences pertinentes du système quantique ainsi que leur dépendance en fonction des paramètres caractéristiques est indispensable. En outre une analyse profonde de la réponse du système quantique aux fréquences présentes dans le spectre du bruit est nécessaire.

Ce domaine de la décohérence est actuellement très discutée tant d'un point de vue expérimentale que théorique. La plupart des théories existantes sont basées sur un traitement perturbatif du couplage qui néglige l'enchevêtrement des états quantiques de l'environnement et du système quantique. Nous souhaitons mieux comprendre les limites de cette approche en étudiant l'influence du couplage sur la nature des états quantiques du système. On s'attend à ce qu'il y ait deux régimes différents : (i) Un régime de basse température, où les états du système quantique et ceux de l'environnement sont essentiellement enchevêtrés. (ii) Un régime à température élevée où un traitement perturbatif, basé sur des états produits, est justifié.

Réseau SQUID comme environnement variable

Un réseau unidimensionnel de petits SQUID est un système intéressant qui peut être utilisé en tant qu'environnement variable pour l'étude des nanocircuits supraconducteurs. Le fonctionnement du réseau est déterminé par deux énergies caractéristiques : l'énergie de couplage Josephson E_J des SQUID qui favorise l'ordre supraconducteur global dans le réseau, et l'énergie de charge E_C qui bloque le transfert des paires de Cooper entre les SQUID et favorise un état isolant. L'énergie E_J dépend du flux magnétique appliqué et peut être variée lors de l'expérience. Si $E_J \gg E_C$, le réseau est dans l'état supraconducteur et la résistance est faible. Si $E_J \ll E_C$, le réseau est un isolant : sa résistance est importante.

L'expérience de Watanabe et Haviland a montré comment le comportement quantique d'une petite jonction Josephson couplée à un tel environnement change en fonction du flux magnétique. Etant donné l'importance de ce résultat pour de futures études, nous souhaitons développer une interprétation détaillée de l'expérience, basée sur une description théorique systématique du réseau de SQUID en tant qu'environnement.

Selon la valeur de E_J/E_C il faut distinguer deux cas. (i) $E_J/E_C \gg 1$, où le réseau se comporte comme une faible résistance linéaire. La phase supraconductrice fluctue faiblement et une approximation gaussienne type onde de spins est correcte. (ii) $E_J/E_C \ll 1$, où le réseau est un élément non-linéaire très résistif. La phase fluctue fortement (*phase slips*) ; et une description basée sur le modèle XY est appropriée. Le cas $E_J/E_C \sim 1$ est particulier : le réseau subit une transition métal-isolant et est caractérisé par un comportement critique.

SUPRACONDUCTIVITE DANS LES RESEAUX KONDO

L'état fondamental pour dopage nul des supraconducteurs à haute température critique est un isolant de Mott. L'entropie résiduelle due au degré de liberté du spin rend le problème très difficile, donc l'étude de l'état supraconducteur est aussi complexe. La supraconductivité apparaît de façon similaire dans les métaux avec un réseau d'impuretés magnétiques, mais sans entropie résiduelle pour l'état fondamental. Ces systèmes sont bien modélisés par un réseau Kondo: un gaz de fermions avec une interaction antiferromagnétique avec les spins localisés. L'interaction Kondo génère aussi une interaction antiferromagnétique entre les spins localisés (interaction RKKY). L'hybridation Kondo dans l'état singulet entre les fermions et les spins rends le système isolant sans entropie résiduelle. Le dopage génère des spins célibataires qui (i) sont délocalisés à cause de l'hybridation avec le gaz de fermions, et (ii) sentent une attraction à cause de l'interaction RKKY. Le système devrait donc être supraconducteur pour certaines valeurs des paramètres. Ce type de mécanisme a été proposé il y a 10 ans par Andrei et Coleman.

Nous avons récemment analysé une version simplifiée de ce modèle mais où la répulsion à coeur dur de spin célibataire est tenue en compte. Cette interaction avait été négligée auparavant, mais elle est cruciale pour comprendre la compétition entre la symétrie s et d du supraconducteur. La technique développée peut être appliquée au modèle complet maintenant et nous nous proposons donc une étude détaillée de la supraconductivite dans un réseau Kondo tenant en compte la répulsion à coeur dur des porteurs.

BRUIT ET CONDUCTANCE DANS DES SYSTEMES MESOSCOPIQUES HORS EQUILIBRE

Le transport électrique à basse température dans les métaux de dimensions réduites est étudié depuis une quinzaine d'années. Nous savons aujourd'hui que les électrons se propagent de façon cohérente dans ces conducteurs mésoscopiques. Par conséquent, il faut tenir compte des effets d'interférence quantique qui donnent lieu à des dépendances non-banales de la conductance, par exemple en fonction de la température, du champ extérieur ou de la dimension (effet Aharonov-Bohm, localisation faible, fluctuations universelles de conductance, etc.).

BRUIT DE GRENAILLE ET $1/f$

Une mesure du bruit du courant permet d'obtenir des informations sur les corrélations entre électrons. Ces corrélations peuvent être liées non seulement aux interférences quantiques, mais aussi aux interactions entre électrons ou bien aux effets relatifs à la statistique des électrons. Par exemple, la théorie prédit que le principe de Pauli donne lieu aux corrélations fermioniques qui diminuent la puissance de bruit de grenaille S au-dessous de sa valeur classique $S_0=2eI$ dans un métal diffusif $S=S_0/3$.

Le bruit de grenaille ne constitue que la partie indépendante de la fréquence f dans le spectre de bruit. Il existe aussi une composante en $1/f$, qui caractérise le spectre de fluctuations de résistance attribuées au mouvement thermique de défauts. Dans les métaux mésoscopiques, le mouvement d'un centre de diffusion sur une distance supérieure à $1/k_F$ produit une variation de conductance de l'ordre de e^2/h (phénomène de fluctuations universelles). Il en résulte que le bruit en $1/f$ peut être augmenté en baissant la température, puisque la longueur L_\square sur laquelle les électrons se propagent de façon cohérente augmente.

Dans la réflexion d'Andreev, si le métal est désordonné, la conductance dans la bande interdite est fortement affectée par l'effet des interférences mésoscopiques. En effet, le transfert de deux électrons est lié à la diffusion cohérente de type particule-particule au voisinage de l'interface entre N et S. Des premiers résultats théoriques sur le bruit dans les jonctions NS diffusives ont été obtenus. Par exemple, on s'attend à un doublement de bruit de grenaille, $S=2 S_0/3$, puisque la charge des paires de Cooper qui franchissent l'interface entre N et S est $2e$. Une expérience très récente a confirmé cette prédiction.

Quant au bruit en $1/f$, les expériences de Jehl indiquent une augmentation de ce bruit à basse température.

Cependant, une description théorique complète du bruit dans les systèmes NS manque. Le résultat $S=2 S_0/3$ pour le bruit de grenaille n'a été obtenu que dans une géométrie simple (quasi-unidimensionnelle, le désordre n'est contenu que dans une zone d'une longueur inférieure à la longueur totale du métal diffusif); la propagation cohérente n'a été considérée qu'à énergie nulle. Pour ce qui est du bruit en $1/f$ dans les jonctions NS, aucun traitement théorique n'existe actuellement.

Nous pouvons donc considérer en détail les problèmes suivants :

1. *Bruit de grenaille dans une jonction tunnel NS.* Avec la technique de l'Hamiltonien tunnel et la théorie des perturbations associées nous pouvons : (i) étudier les effets associés à la présence d'une interface diffusif entre N et S ainsi qu'à la propagation cohérente d'une paire de Cooper dans N à énergie non-nulle. (ii) trouver la dépendance du spectre de bruit en tension appliquée, qui peut donner des informations sur la structure 'interne' de la paire de Cooper.
2. *Bruit en $1/f$ dans une jonction NS.* La technique introduite par Feng, Lee, et Stone devrait permettre d'obtenir la dépendance en L_{\square} du spectre de bruit. Ainsi nous pourrions être capable de faire une comparaison plus précise avec les résultats des expériences de Jehl *et al.*.

La technique développée récemment par M. V. Feigel'man, A. I. Larkin, et M. A. Skvortsov, [cond-mat/9907358 et cond-mat/0008463] est la plus générale pour étudier ces problèmes. Elle permet de considérer simultanément la présence du désordre, la supraconductivité et le fait que le système n'est pas à l'équilibre. Nous envisageons d'appliquer cette technique aux différents problèmes proposés.

ANDREEV REFLEXION DANS LE $H T_C$ SC

Les mesures des caractéristiques $I-V$ dans les jonctions NS pour les supraconducteurs à haute température critique ont démontré la présence de deux échelles d'énergie différentes dans la phase "sous-dopée". L'une de l'ordre du (pseudo)-gap d'excitation, et l'autre de l'ordre de la température critique. Ces résultats expérimentaux sont inexplicables à ce moment. En particulier nous sommes intéressés par comprendre l'origine de l'échelle d'énergie plus petite proportionnelle à T_c . La question théorique ouverte est comment une échelle d'énergie associée à T_c peut être vue dans une caractéristique $I-V$ à basse température. Une possibilité est que T_c soit due aux fluctuations de phase du paramètre d'ordre supraconducteur et que les mêmes fluctuations interviennent aussi dans le transport à basse température. Nous nous proposons donc de mener une investigation sur l'effet des fluctuations de phase temporelles et spatiales dans les supraconducteurs sur la caractéristique $I-V$ d'une jonction NS.

II –3 – 2 liste des équipes internes de l'unité

Libellé de l'équipe interne (sous-composante fonctionnelle de l'unité) (1)	Responsable	Autres chercheurs membres Equipe	Thématiques et opérations (2)	Eff. équipe (ter.)
NANOPHYSIQUE	HEKKING Frank	P. SCHUCK, F. PISTOLESI	Nanophysique, propriétés électroniques des nano.objets	
INTERFACES SYSTEMES COMPLEXES	PASTUREL Alain	O . LEBACQ P. PEYLA	Croissance, transitions de phases, relation structure/propriétés	
ONDES EN MILIEU DIFFUSIF	VAN TIGGELEN Bart	R. MAYNARD, S. SKIPETROV, F. FAURE	Ondes en milieux diffusifs, effet magnétique, effet non linéaire, sismologie.	

- (1) Sous-composante fonctionnelle correspondant à l'organigramme de l'unité, une ligne par équipe
- (2) Thématiques et opérations c'est-à-dire les axes de l'activité scientifique
- (3) Les enseignants-chercheurs et chercheurs intervenant dans plusieurs équipes sont décomptés au prorata des temps respectifs
- (4) Type d'activité (ERT internes, autres). Pour les ERT internes remplir par ailleurs un dossier propre