

Laboratoire de Physique Théorique¹
UMR CNRS/UPS 5152

Rapport d'Activité 2002-2003²

Directeur: Didier POILBLANC³

1. Création: janvier 2003

2. Mise à jour: décembre 2003

3. Responsable du Groupe de Physique Théorique depuis novembre 2001, directeur de l'UMR depuis janvier 2003

Table des matières

1	Présentation du Laboratoire de Physique Théorique	5
1.1	Bref historique de la constitution du laboratoire	5
1.2	Chercheurs & enseignants-chercheurs	5
1.3	Liste des équipes internes	5
1.4	Étudiants en thèse	6
1.4.1	Liste	6
1.4.2	Sujet des thèses soutenues depuis janvier 2002	6
1.5	Post-docs & visiteurs longue durée	6
1.6	Moyens	6
2	Rapport scientifique	9
2.1	Magnétisme et fermions fortement corrélés	9
2.1.1	Objectifs	9
2.1.2	Thématiques scientifiques et matériaux	10
2.1.3	Modélisation & simulations	11
2.1.4	Quelques résultats scientifiques récents	14
2.1.5	Perspectives en théorie de la matière condensée	17
2.2	Physique statistique des systèmes complexes	18
2.2.1	Turbulence 2D et mécanique statistique des tourbillons	18
2.2.2	Mécanique statistique des systèmes auto-gravitants	19
2.2.3	Equations cinétiques généralisées et thermodynamique effective	21
2.2.4	Particules browniennes auto-gravitantes	22
2.2.5	Physique statistique des pavages aléatoires	24
2.2.6	Systèmes dynamiques discrets et systèmes complexes hors équilibre	24
2.2.7	Physique statistique et biologie	25
2.2.8	Applications de la physique statistique à l'Informatique	26
2.2.9	Persistence	26
2.2.10	Applications des processus stochastiques aux systèmes purs et désordonnés	27
2.2.11	Modèles de croissance aléatoires et matrices aléatoires	28
2.2.12	Transitions de phases dynamiques	28
2.2.13	Effets électrostatiques dans les films de savon	28
2.2.14	Milieux Granulaires	29
2.2.15	Les verres de spins en champ moyen généralisé	29
2.3	Cohérence quantique & information quantique	29
2.3.1	Localisation d'Anderson en présence d'interaction.	30
2.3.2	Effets des imperfections sur le calcul quantique; nouveaux algorithmes	31
2.3.3	Ondes dans un fluide en rotation	34
2.3.4	Autres travaux.	35
2.3.5	Thèses, postdocs, habilitations.	35
2.3.6	Prospective	35
2.4	Dynamique non linéaire des systèmes de fermions finis	35
2.4.1	Présentation des thématiques scientifiques	36
2.4.2	Réponse semi linéaire dans les agrégats libres	36
2.4.3	Agrégats en champ laser intense	36
2.4.4	Agrégats en matrice	37
2.4.5	Autres réalisations	37

3	Bilan quantitatif 2002-2003	39
3.1	Publications dans des revues à comité de lecture (RCL)	39
3.2	Actes de colloques	44
3.3	Conférences invitées	45
3.4	Activités internationales	47
3.4.1	Réseaux internationaux & contrats	47
3.4.2	Organisations de conférences, workshops et rencontres	48
3.5	Rayonnement local & national	48
3.5.1	Programmes Pluriformations (PPF)	48
3.5.2	Participations aux GDR	49
3.5.3	Participations à des instances nationales ou locales et responsabilités diverses	49
3.5.4	Distinctions	50
4	Orientation scientifique & politique de recrutement	51

Chapitre 1

Présentation du Laboratoire de Physique Théorique

1.1 Bref historique de la constitution du laboratoire

Le Laboratoire de Physique Théorique (LPT) créé en janvier 2003 comme Unité Mixte de Recherche (CNRS-Université) est issu du Groupe de Physique Théorique (GPT) lui-même initialement créé le 1er octobre 1991 sous l'impulsion de Jean Bellissard. Cette opération avait été menée à Toulouse par la DRED et le SPM afin de renforcer la physique fondamentale à l'Université Paul Sabatier. Jean-Pierre Daudey, alors directeur du Laboratoire de Physique Quantique (URA 5626 en 1991, devenu UMR 5626 en 1995 et actuellement dirigé par Nadine Halberstadt) a accueilli en 1991 le GPT au sein de son laboratoire dont la majorité des chercheurs se consacre aux méthodes de calcul de la Chimie Quantique. Comme prévu, notre groupe qui avait vocation à devenir indépendant a, une fois la taille critique atteinte, demandé en 2002 sa constitution en UMR séparée. Après examen de l'activité scientifique et des projets par un Comité d'Evaluation extérieur présidé par Michel Le Bellac (INLN, Nice), notre groupe a obtenu le statut d'UMR dans le cadre du contrat quadriennal 2003-2006. Il est resté membre à part entière de la Fédération de Recherche « Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques et Moléculaires Complexes (IRSAMC) » reconnue par le CNRS et dirigée par Eric Suraud et a conservé ses locaux.

1.2 Chercheurs & enseignants-chercheurs

Le GPT a atteint fin 2000 un maximum de 17 permanents. Le Laboratoire de Physique Théorique a intégré la quasi-totalité de ces chercheurs et est composé au 1er décembre 2003 de 15 permanents (cf. Table 1). Les départs récents (2000-2001) de 4 membres (dont 1 détachement du CNRS et 1 disponibilité du MEN) ont été partiellement compensés par 2 recrutements successifs (Matthieu Mambrini comme CR2-CNRS en oct. 2002 et Phuong Mai Dinh comme MCF en sept. 2003). L'équilibre satisfaisant CNRS/MENRT est toujours respecté (7 chercheurs CNRS & 8 enseignant-chercheurs). La composition du LPT et les thématiques qui y sont développées justifient l'examen à la fois par les experts des sections 02 (section principale) et de 06 du CNRS ainsi que par ceux de la section 29 du CNU. En plus des recrutements récents, il convient de noter la réussite au concours DR2 de Satya Majumdar (section 02) en oct. 2003. Il faut aussi signaler que le LPT bénéficiera probablement d'un poste de professeur en section 29 à la rentrée 2004 pour remplacer Eric Sørensen actuellement au Canada (Université de Mc Master).

1.3 Liste des équipes internes

Le projet de recherche pour le plan quadriennal en cours (2003-2006) comprend les 4 thèmes présentés ci-dessous (voir aussi Table 1.2).

- Magnétisme quantique & systèmes fermioniques à fortes corrélations (FFC)
- Cohérence quantique & information quantique (CQIQ)
- Physique statistique des systèmes complexes
- Dynamique non-linéaire des systèmes de fermions finis - Agrégats

TAB. 1.1 – *Enseignants-chercheurs/chercheurs du Laboratoire de Physique Théorique. Les 2 enseignant-chercheurs en détachement et en mise en disponibilité sont en italique.*

<i>Nom</i>	<i>Poste et date d'arrivée</i>	<i>Commentaires</i>	<i>Section</i>
Belkacem Mohamed	MCF UPS, oct. 2000		29 CNU
Capponi Sylvain	MCF UPS, oct. 2000		29 CNU
Chavanis Pierre-Henri	CR1, oct. 98	promu CR1 en oct. 2001	02 CNRS
Dean David	Prof. 2e Cl., oct. 98		29 CNU
Dinh Phuong Mai	MCF UPS, sept. 2003		29 CNU
Destainville Nicolas	MCF UPS, oct. 98		29 CNU
Fleckinger Robert	Prof. 2e Cl. UPS		29 CNU
Frahm Klaus	Prof. 2e Cl. UPS, oct. 97	promu PR2 en fév. 2000	29 CNU
Georgeot Bertrand	CR1, oct. 96	promu CR1 en oct. 2000	02 CNRS
<i>Mila Frédéric</i>	CR1, oct. 93	détaché EPF-Lausanne en oct. 2000	02 CNRS
Majumdar Satya	DR2, oct. 99	promu DR2 en oct. 2003	02 CNRS
Mambrini Matthieu	CR2, oct. 2002		06 CNRS
Poilblanc Didier	DR2, juil. 92	promu DR2 en oct. 98	06 CNRS
Shepelyansky Dima	DR2, oct. 92		02 CNRS
Sire Clément	CR1, oct. 91		02 CNRS
<i>Sørensen Erik</i>	Prof. 2e Cl. UPS, déc. 96	en disponibilité (déc. 2001)	29 CNU
Suraud Eric	Prof. 1e Cl. UPS, oct. 92	promu PR1 en 1998	29 CNU

1.4 Étudiants en thèse

1.4.1 Liste

Le GPT/LPT a, depuis sa création et, en particulier depuis janvier 2002 (cf. liste Table 1.3), formé un nombre important de doctorants de provenance diverse.

1.4.2 Sujet des thèses soutenues depuis janvier 2002

1. Eric Giglio (janvier 2002): Dynamique moléculaire dans les agrégats fortement excités: approche semi-classique.
2. Fabien Alet (juin 2002): Etude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs.
3. Gaëtan Caldara (décembre 2002): Effets des interactions sur les systèmes 2d désordonnés
4. Raphaël Cherrier (2 juillet 2003): Etude de systèmes de spins complexes ou désordonnés : analogies avec la transition vitreuse structurelle.
5. Alexandre Lefèvre (3 juillet 2003): États métastables dans les systèmes vitreux : des verres de spins aux milieux granulaires.
6. David Magnoux (juillet 2003): Mise en ordre de charge et de spin dans les manganites à magnétorésistance colossale: couplage au réseau et dégénérescence orbitale.
7. Mohamed Belkacem (5 décembre 2003): **Habilitation** « Systèmes fermioniques finis hors équilibre: des noyaux aux agrégats atomiques ».

1.5 Post-docs & visiteurs longue durée

Voir liste Table 1.4.

1.6 Moyens

Le LPT occupe actuellement $\sim 400 m^2$ de bureaux et de locaux informatiques et reçoit un soutien récurrent de la part du CNRS et du MEN. Nous déplorons malheureusement une baisse très importante du

<i>Nom</i>	<i>Poste</i>	<i>Thématique/équipe</i>	<i>Section</i>
Belkacem Mohamed	MCF UPS	Agrégats	Section 29 CNU
Capponi Sylvain	MCF UPS	Fermions fortement corrélés	Section 29 CNU
Chavanis Pierre-Henri	CR1	Physique statistique	Section 02 CNRS
Dean David	Prof. 2e Cl.	Physique statistique	Section 29 CNU
Destainville Nicolas	MCF UPS	Physique statistique	Section 29 CNU
Dinh Phuong Mai	MCF UPS	Agrégats	Section 29 CNU
Fleckinger Robert	Prof. 2e Cl. UPS	Cohérence quantique	Section 29 CNU
Frahm Klaus	Prof. 2e Cl. UPS	Cohérence quantique	Section 29 CNU
Georget Bertrand	CR1	Cohérence quantique	Section 02 CNRS
Majumdar Satya	DR2	Physique statistique	Section 02 CNRS
Mambrini Matthieu	CR2	Fermions fortement corrélés	Section 06 CNRS
Poilblanc Didier	DR2	Fermions fortement corrélés	Section 06 CNRS
Shepelyansky Dima	DR2	Cohérence quantique	Section 02 CNRS
Sire Clément	CR1	Physique statistique	Section 02 CNRS
Suraud Eric	Prof. 1e Cl. UPS	Agrégats	Section 29 CNU

TAB. 1.2 – Répartition thématique des enseignants/chercheurs affectés au Laboratoire de Physique Théorique

soutien annuel de base CNRS (département SPM), actuellement de seulement **25 kEuros H.T.** (budget 2003) contre **38.1 kEuros H.T.** pour le GPT en 2002. En revanche le soutien de base du MENRT a été maintenu pour la première année de fonctionnement de notre UMR avec un budget 2003 de **42.5 kEuros TTC** (à comparer au budget équivalent de **36 kEuros H.T.** en 2002).

En ce qui concerne le personnel ITA, Sylvia Scaldaferro (AI, CNRS) assure le secrétariat et la comptabilité (à temps partiel avec une activité complémentaire dans l'animation de l'IRSAMC). Le laboratoire bénéficie aussi des services des ingénieurs informaticiens et des moyens communs de l'Institut IRSAMC (Bibliothèque, etc...) auquel il appartient. Patrick Perez (AI) recruté officiellement par le Laboratoire de Physique Quantique (UMR5626) en 2002 sur une opération CNRS *Noémi* travaille en fait de façon prioritaire pour le LPT comme convenu préalablement par les directions de nos 2 laboratoires. Une intégration officielle au sein du LPT pourrait être envisagée dans le futur.

Pour ses calculs, le laboratoire dispose d'un parc assez récent de machines LINUX et de terminaux dont 8 PC de calcul de type bi-processeurs à 2 Ghz (ou plus) avec 2Gb ou 4Gb de mémoire. Une amélioration nette de l'exploitation de ces machines a été initiée en 2003 grâce à la mise en place d'un cluster géré par PBS. En outre, les membres du laboratoire sont, pour la plupart, de gros utilisateurs des ressources mises à disposition par les centres de calcul nationaux comme IDRIS (Orsay).

TAB. 1.3 – *Étudiants doctorants en 2002-2003*

<i>Nom</i>	<i>Provenance/Financement</i>	<i>Responsable</i>	<i>Soutenance</i>
Alet Fabien	MENRT 99-2002	E. Sørensen	juin 2002
Caldara Gaëtan	ENS Ulm & AC 99-2002	K. Frahm	fin 2002
Cherrier Raphaël	ENS Lyon, MENRT, moniteur, 99-2002	D. Dean	juillet 2003
Chiappa Olivier	MENRT 99-2002	D. Poilblanc	–
Desoutter Vianney	MENRT, moniteur, 2001-2004	N. Destainville	prévue 2004
Laflorencie Nicolas	MENRT, moniteur, 2000-2003, ATER 2003	K. Frahm/D. Poilblanc	prévue 2004
Lefèvre Alexandre	X, AMX 2000-2003	D. Dean	juillet 2003
Legrand Carmen	- 2000-2003	E. Suraud	–
Lévi Benjamin	ESCPI, MENRT, moniteur, 2001-2004	B. Georgeot/D. Shepelyansky	prévue 2004
Ma Leang Ming	MENRT, 2000-2003	E. Suraud	prévue 2004
Magnoux David	MENRT, moniteur, 2000-2003	D. Poilblanc/J.F. Bobo	juillet 2003
Mégi Fabien	MENRT, 2001-2004	M. Belkacem/E. Suraud	prévue 2004
Poméransky Andrei	bourse USA/CNRS 2001-2004	D. Shepelyansky/B. Georgeot	prévue 2004
Sopik Julien	MENRT, 2003-2006	C. Sire	prévue 2006

TAB. 1.4 – *Post-doctorants, professeurs invités (PI) & visiteurs ayant effectués des séjours d'au moins 1 mois pendant la période 2002-2003.*

<i>Nom</i>	<i>Financement</i>	<i>Responsable/Contact</i>	<i>Dates</i>
Bettelli Stefano	post-doc EC	D. Shepelyansky	oct. 20001-sept. 2004
Dinh Phuong Mai	ATER (UPS)	E. Suraud	sept. 2002-août 2003
Khandelwal Swati	post-doc (MENRT)	S. Majumdar	sept. 2002-mai 2003
Ipatov Andrei	chercheur associé CNRS	E. Suraud	oct. 2002-déc. 2002
Läuchli Andreas	post-doc (CA CNRS & Swiss Nat. Fund)	D. Poilblanc	sept. 2002-mai 2004
Mambrini Matthieu	ATER (UPS)	D. Poilblanc	oct. 2001-sept. 2002
Mundt Michael	Diplom (Allemagne)	E. Suraud	sept. 2003-juin 2004
Pohl Andreas	thésitif DAD (All.)	E. Suraud	oct. 2001-mars 2002
Riera José	PI	D. Poilblanc	avril-sept. 2003
Lee Jae-Weon	post-doc EC	D. Shepelyansky	oct. 2001-sept. 2004
Terraneo Marcello	post-doc EC	D. Shepelyansky	oct. 2001-sept. 2004
Zwicknagel Gunter	PI	M. Belkacem	avril 2003
Benenti Giuliano	chercheur associé CNRS	D. Shepelyansky	fev. 2002-avril 2002
Zhirov Oleg	visiteur scientifique	D. Shepelyansky	nov.-déc. 2003

Chapitre 2

Rapport scientifique

Un bref résumé de l'activité scientifique du LPT par thèmes scientifiques est présenté ci-dessous. Signalons que ce « découpage » correspond également assez bien à une répartition par « équipes » même si certains projets peuvent (fort heureusement) impliquer des chercheurs d'équipes différentes. Notons que l'activité « Physique Mathématique » coordonnée de 1991 à 2001 par Jean Bellissard n'est plus représentée au sein du LPT.

2.1 Magnétisme et fermions fortement corrélés

Équipe (permanents): S. Capponi, M. Mambrini, & D. Poilblanc

2.1.1 Objectifs

L'activité décrite ici relève de la théorie de l'état condensé et plus spécifiquement de la compréhension des effets d'interaction (dits effets à N-corps). Les matériaux pour lesquels le terme de répulsion de Hubbard est grand devant la largeur de bande (i.e. $U/t \gg 1$) mettent en jeu des phénomènes physiques caractéristiques des corrélations fortes; la **transition de Mott** en est la manifestation la plus connue dans les systèmes commensurables. C'est le cas, aussi, des transitions quantiques affectant les degrés de liberté de charge et/ou de spin vers de nouvelles phases de type **spin-Peierls**, **Ondes de Densité de Spin** (ODS) ou **Ondes de Densité de Charge** (ODC) ou encore de la **supraconductivité non conventionnelle**. Par ailleurs, les comportements exotiques de ces matériaux doivent souvent faire appel à de **nouveaux concepts**: par exemple, dans les systèmes métalliques, les corrélations fortes peuvent conduire à un **comportement non-liquide de Fermi**. D'autre part, le concept de « **cross-over** » **dimensionnel** joue un rôle capital dans les systèmes de basse dimensionnalité, alors que la **frustration** dans les isolants magnétiques peut aussi donner lieu à de nouvelles phases magnétiques dites désordonnées.

Bien que les champs d'investigations soient très larges en matière de systèmes fortement corrélés, l'intérêt scientifique des membres de cette équipe se porte prioritairement sur les concepts fondamentaux précédents, en raison de la richesse des phases quantiques s'y rattachant, et sur l'influence primordiale que peuvent avoir les corrélations sur les propriétés électroniques:

1. **Systèmes électroniques de basse dimensionnalité**: conducteurs moléculaires organiques-inorganiques (sels de Bechgaard, $(\text{TMTTF})_2\text{X}$, sels à base de BEDT-TTF, complexes d'éléments de transition avec des ligands soufrés et sélénés, etc.), fils et points quantiques, réseau de jonctions Josephson, ...
2. **Oxydes à propriétés remarquables**: isolants de Mott (cuprates, vanadates, manganites), chaînes ou échelles de spins, composés spin-Peierls (tels que CuGeO_3 et NaV_2O_5), oxydes bi-dimensionnels (tels que $\text{CaV}_n\text{O}_{2n+1}$ et La_2CuO_4), chaînes de Haldane (telles que Y_2BaNiO_5 , etc ...), systèmes magnétiques frustrés sur réseaux spinels, pyrochlores ou kagomé, ...
3. **Supraconducteurs non conventionnels**: cuprates supraconducteurs à haute température critique, échelles de spin dopées (telles que $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$), fermions lourds (CeB_6 , UPt_3 , CeCu_2Si_2 , etc.), ruthénates, borocarbures, cobaltites (à réseau triangulaire) etc.

2.1.2 Thématiques scientifiques et matériaux

Situation actuelle

L'activité scientifique actuelle dans le cadre de ce projet s'articule autour de 5 thèmes:

1. Conducteurs de basse dimensionnalité
2. Échelles de spins isolantes ou dopées et supraconducteurs à haute température critique
3. Couplage avec le réseau dans les systèmes de fermions corrélés
4. Manganites à magnétorésistance colossale et modèles Kondo
5. Frustration magnétique 2D et oxydes à dégénérescence orbitale.
6. Impuretés et désordre dans les systèmes magnétiques de basse dimension.

Voici un bref descriptif de la problématique et des enjeux pour chacun de ces thèmes.

1. Conducteurs de basse dimensionnalité

La compréhension de l'effet des corrélations dans les systèmes de basse dimensionnalité reste le problème majeur de la Physique de la Matière Condensée. L'effet des corrélations électroniques se manifeste par de nombreux comportements physiques anormaux et observables expérimentalement, comme par exemple les propriétés de transport. Théoriquement, de nouveaux concepts ont émergé pour expliquer ces anomalies comme, par exemple, dans le cas de chaînes faiblement couplées la notion de « confinement unidimensionnel » des électrons dans les chaînes sous l'effet de l'interaction forte entre particules dans les chaînes.

Les conducteurs organiques quasi-1D constituent un des systèmes expérimentaux privilégiés pour étudier l'effet des interactions électroniques offrant ainsi de nouveaux défis théoriques quand à la compréhension des liquides quasi-1D, dits liquides de Luttinger. Pour le théoricien, les liquides de Luttinger couplés ont un double intérêt: (i) ils permettent de tester les prédictions de modèles théoriques simples et (ii) ils offrent la possibilité d'étudier le cross-over dimensionnel entre une et deux dimensions.

2. Isolants de Mott dopés et supraconductivité non conventionnelle

Certains aspects de la physique des perovskites supraconducteurs s'inscrivent également dans les thématiques de cette équipe comme la nature de la phase dite « normale », la possibilité d'un nouveau mécanisme pour la supraconductivité ou encore l'absence de transport cohérent dans la direction de plus faible conductivité.

De nouvelles orientations ont été développées au cours des dernières années dans le domaine des **chaînes de spins avec gap** et des **échelles de spins, dopées ou non**. De nouveaux composés très proches des perovskites supraconducteurs mais très anisotropes offrent aussi des comportements physiques anormaux. Ces systèmes, dont certains ont été très récemment synthétisés, peuvent constituer des réalisations presque idéales de chaînes de Haldane de spin 1 antiferromagnétiques (Y_2BaNiO_5), d'échelles (i.e. doubles chaînes) 1D (SrCu_2O_3) etc. On peut maintenant doper certains de ces matériaux et en faire des systèmes métalliques où les corrélations ont un rôle essentiel ($\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{2.5}$, $\text{Y}_{2-x}\text{Ca}_x\text{BaNiO}_5$ etc.). Un état supraconducteur a été découvert (sous pression) dans $(\text{Sr,Ca})_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41+\delta}$, un composé qui possède à la fois des chaînes et des échelles. L'existence de supraconductivité dans les échelles de spin dopées est un fait capital qui doit orienter fortement les recherches sur les mécanismes de la supraconductivité à haute température critique. La découverte récente de supraconductivité dans des cobaltites avec réseau triangulaire frustré conduit à de nouvelles questions fondamentales.

Les phases supraconductrices des ruthénates ou de certains borocarbures sont également non conventionnelles et le rôle des corrélations dans le mécanisme d'appariement est encore très mal compris.

3. Couplage avec le réseau dans les systèmes de fermions corrélés: instabilité spin-Peierls et instabilités de charge dans des systèmes à bande 1/4-remplie

Le composé CuGeO_3 est le premier composé spin-Peierls (isolant de Mott) inorganique. Le mécanisme de la transition est encore mal compris et est lié en partie à la frustration magnétique (cf ci-dessous) et aussi aux couplages magnétoélastiques. Dans certains systèmes électroniques à bande 1/4-remplie, l'effet conjoint de la répulsion coulombienne et du couplage avec le réseau conduit à des instabilités *conjointe* de charge et de spin. C'est le cas, par exemple, de certains sels de Bechgaard-Fabre tels que $(\text{TMTTF})_2\text{PF}_6$ qui présentent une localisation de charge autour de 100K et à plus basse température, une transition SP. Très récemment une nouvelle transition « ferroélectrique » a été découverte dans plusieurs de ces composés. Les propriétés du nouveau composé NaV_2O_5 ont également été interprétées en terme d'échelle 1/4-remplie.

4. Manganites à magnéto-résistance colossale et modèle Kondo

Les systèmes comme $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_4$ présentent des propriétés de transport exceptionnelles liées à une transition vers un état ferromagnétique. La complexité et l'originalité de ces composés résident dans l'existence sur les mêmes sites de Mn d'électrons localisés (spins 3/2) et d'électrons délocalisés. Un modèle Kondo ferromagnétique semble approprié pour décrire ce système.

5. Frustration magnétique 2D et oxydes à dégénérescence orbitale.

Frustration, liquides de spins.

La physique de basse énergie du modèle de Heisenberg antiferromagnétique pour des spins 1/2 en deux dimensions recèle une grande variété de comportements (ouverture d'un gap de spin, apparition d'un ordre là où classiquement le système serait désordonné, comportement de type « verre de spin »), pour certains mal compris, lorsque l'on est en présence de frustration. Outre l'intérêt théorique que présente l'étude de ces modèles, il se trouve qu'ils décrivent de manière satisfaisante de nombreux composés réels (par exemple CaV_4O_9 , $\text{Li}_2\text{VO}_2\text{SiO}_4$, $\text{Li}_2\text{VOGeO}_4$). Le comportement « liquide de spins » est également recherché dans des systèmes de géométrie kagomé (SCGO) ou pyrochlore (comme $\text{RE}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$) ou dans des systèmes de dimères en interaction comme $\text{Sr}_2\text{Cu}(\text{BO}_3)_2$ (réseau 2D de Shastry-Sutherland) ou TlCuCl_3 (réseau 3D). Des comportements observés dans $\text{SrCr}_{9-x}\text{Ga}_{3+x}\text{O}_{19}$ (SCGO) sont encore largement inexplicables (vieillessement, thermodynamique non conventionnelle à basse température) mais apparaissent comme des manifestations de la frustration.

Oxydes à dégénérescence orbitale.

Dans certains oxydes les électrons localisés peuvent occuper deux orbitales (dégénérescence orbitale). L'interaction devient alors plus complexe qu'un simple mécanisme d'échange et met en jeu un couplage spin-orbital. Les propriétés les plus spécifiques de certains de ces oxydes sont vraisemblablement bien décrites par la version la plus symétrique de ces modèles spin-orbitaux, le modèle $SU(4)$.

6. Impuretés et désordre dans les systèmes magnétiques de basse dimension.

La thématique des systèmes de spins en interaction soumis à du désordre présente une grande richesse de comportements et ouvre un large champ d'investigation. D'un point de vue expérimental, la présence de défauts ou d'impuretés dans des systèmes magnétiques peut donner naissance à de nouvelles phases à basse température où les fluctuations quantiques dominent la physique. Le traitement des effets coopératifs du désordre et des fluctuations quantiques est un défi théorique et est essentiel pour l'interprétation des expériences.

Systèmes unidimensionnels

Les réalisations expérimentales de chaînes de spins quantiques soumises à du désordre sont nombreuses. La substitution des atomes de cuivre par du zinc, du magnésium, voire du nickel dans le composé spin-Peierls CuGeO_3 donne naissance à une coexistence entre dimérisation et ordre antiferromagnétique. La mise en ordre antiferromagnétique apparaît aussi dans de nouveaux matériaux comme $\text{Sr}(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_2\text{O}_3$ (échelle de spins), $\text{Pb}(\text{Ni}_{1-x}\text{Mg}_x)_2\text{V}_2\text{O}_8$ ou encore LiCu_2O_2 . Par ailleurs $\text{Sr}_3\text{CuPt}_{1-x}\text{Ir}_x\text{O}_6$ et $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_3$ sont des chaînes de spins 1/2 où l'échange est aléatoirement ferromagnétique ou antiferromagnétique et offrent, d'un point de vue théorique, un nouveau champ d'étude.

Systèmes bidimensionnels, liquides de spins

L'étude du dopage des liquides de spins bidimensionnels par des impuretés statiques non magnétiques présente au moins un triple intérêt :

- elles sont présentes dans les composés de type liquides de spins tels que $\text{SrCr}_{9-x}\text{Ga}_{3+x}\text{O}_{19}$,
- une physique exotique et mal connue, très différente de celle observée lorsque l'on dope des systèmes ordonnés se développe,
- leur étude constitue un préalable indispensable à l'étude de systèmes contenant des trous mobiles candidats à une supraconductivité non-conventionnelle.

2.1.3 Modélisation & simulations

Modélisation des systèmes de fermions corrélés

L'activité essentielle de cette composante concerne, de façon générale, la modélisation des systèmes de fermions corrélés à une ou deux dimensions afin de mieux comprendre les propriétés physiques de l'ensemble très vaste des matériaux décrits ci-dessus.

Les types de modèles qui ont été développés sont de plusieurs types:

1. Modèles de Heisenberg (spin-1/2) en dimensionnalité réduite

Dans ce cas, il s'agit de l'étude de composés isolants magnétiques de spin-1/2 décrits par des modèles de type Heisenberg quantique. En raison de la faible valeur du spin, les fluctuations quantiques jouent un rôle essentiel. La frustration magnétique, les effets de dimensionnalité réduite et les effets du désordre peuvent être inclus dans ce type d'études (cf. figure 2.1).

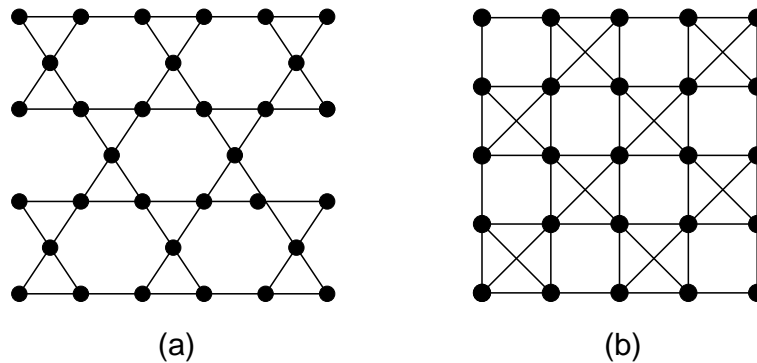


FIG. 2.1 – Exemples de réseaux frustrés: (a) réseau kagomé, (b) réseau damier (version bidimensionnel du réseau pyrochlore)

2. Modèles de Hubbard et t-J généralisés

La motivation initiale pour l'étude de ces modèles est bien sûr la compréhension des propriétés physiques des perovskites supraconducteurs à haute température critique (type LaSrCuO , YBaCuO , etc ...). Les modèles étudiés doivent donc inclure (i) la structure quasi-2D, (ii) le magnétisme AF et (iii) les corrélations fortes, les deux derniers points étant en fait reliés. Le modèle t-J, par exemple, défini sur un réseau 2D est le plus simple pouvant décrire les plans CuO_2 . Un certain degré de frustration est introduit de façon dynamique par le mouvement des trous. Ce modèle est la version couplage fort du modèle de Hubbard contenant un terme de répulsion intrasite qui rend énergétiquement défavorable (mais contrairement au modèle t-J n'interdit pas complètement) la double occupation des sites. Malgré leur apparente simplicité, peu de choses sont vraiment connues sur ce type de modèles décrivant les systèmes fortement corrélés (en particulier l'existence d'une phase supraconductrice!).

De nombreuses extensions de ces modèles peuvent être considérées, pour, par exemple,

- tenir compte de façon plus réaliste de la structure de bande des matériaux réels (termes de sauts à plus longue portée)
- décrire des systèmes de dimensionnalité plus réduite (chaînes, échelles, etc.),
- étudier l'effet du potentiel coulombien non écranté, etc.

3. Modèles spins-phonons et électrons corrélés-phonons

Les degrés de liberté du réseau peuvent jouer un rôle essentiel dans les systèmes de spins ou dans les systèmes électroniques corrélés. Un exemple typique est le cas des chaînes de spins qui présentent une instabilité de type spin-Peierls. Dans ce cas, le couplage entre les spins et le réseau est directement responsable de l'instabilité. Pour comprendre ce type d'effets, on est donc amené à étudier des modèles de type spin-phonon où les intégrales d'échanges magnétiques sont modulées par les déplacements atomiques ou encore des modèles de type t-J-Holstein où les degrés de liberté de charge sont couplés à la dynamique des phonons.

4. Modèles avec dégénérescence orbitale

Dans les oxydes corrélés comme les nickelates ou les manganates, la dégénérescence orbitale joue un rôle capital. Dans ce contexte, une étude des manganates à magnétorésistance colossale ($\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$) a été débutée en utilisant des modèles de type Kondo ferromagnétique incluant un couplage de Hund entre des électrons localisés (spins 1/2 ou 3/2) et des électrons itinérants (pouvant aussi être corrélés).

Simulations numériques

Pour l'ensemble des composés décrits précédemment, la répulsion coulombienne est typiquement plus grande que la largeur de bande caractéristique (correspondant à l'énergie cinétique des électrons). Pour traiter ces systèmes, la difficulté théorique réside dans l'impossibilité d'appliquer les techniques usuelles de couplage faible et les méthodes perturbatives. D'autre part, les chances de succès des méthodes variationnelles sont toujours liées au choix des fonctions d'essai (et donc, en particulier, à l'intuition physique), particularité qui fait des méthodes variationnelles des méthodes non contrôlées et peu fiables. Dans ce contexte, il est apparu indispensable de pouvoir disposer de méthodes nouvelles non subjectives et parfaitement contrôlées. Les méthodes numériques se sont récemment imposées comme des méthodes puissantes et efficaces pour aborder le problème des corrélations électroniques en matière condensée. Au cours des 10 dernières années, les progrès réalisés ont été très importants et le développement très rapide des super-ordinateurs laisse présager d'un véritable essor de ce type d'approche dans les années à venir.

L'activité « calcul numérique » est désormais une des spécificités de pointe du Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse et est internationalement reconnue. Elle bénéficie d'un couplage très fort avec le centre de calcul IDRIS (Orsay) du CNRS et de collaborations internationales avec les groupes de pointes dans ce domaine (ETH-Zürich & Univ. de Lausanne, UC Santa Barbara, NHMFL Tallahassee, LPTL Jussieu, Univ. Stanford & SLAC, etc.). Les méthodes numériques développées dans le groupe sont de plusieurs types :

1. Méthodes de diagonalisations exactes – Algorithme de Lanczos

Les études de tailles finies utilisant des techniques de diagonalisations exactes de petits amas (« clusters ») s'avèrent très prometteuses et donnent accès aux instabilités du système. Une méthode souvent utilisée est basée sur l'algorithme de Lanczos qui permet de diagonaliser de très grosses matrices. La mémoire disponible sur les super-ordinateurs vectoriels (type NEC SX5 du centre IDRIS de Paris) permet actuellement de traiter des systèmes de plus en plus importants (jusqu'à 40 sites). Les études numériques basées sur la méthodes de Lanczos sont de plusieurs types:

- Extrapolations de tailles finies: les grandeurs physiques fondamentales peuvent être calculées à la limite thermodynamique.
- Propriétés spectrales – Fonctions de corrélation dynamiques: ces études permettent de comparer directement les prédictions des modèles théoriques aux expériences qui donnent accès à différentes fonctions de corrélations dynamiques (spectroscopie, diffusion inélastique de neutrons, RMN, etc.). Il s'agit de la seule méthode numérique vraiment fiable permettant d'obtenir ce type d'informations.
- Propriétés thermodynamiques: la méthode de Lanczos permet aussi, si nécessaire, d'obtenir tout le spectre des états à N-corps et donne donc accès à la thermodynamique.
- Traitement, sur le même plan de l'interaction électron-électron et de l'interaction électron-phonon: nous avons été précurseur de l'utilisation de la technique des diagonalisations exactes dans le traitement de l'effet dynamique du réseau.

2. Calculs variationnels type RVB

Les problèmes de magnétisme sur réseaux frustrés sont traditionnellement traités numériquement par les méthodes de diagonalisations exactes présentées ci-dessus. Jusqu'à il y a peu (2000), cette méthode était la seule disponible pour les systèmes bidimensionnels (difficultés du DMRG pour $d = 2$, et du Monte Carlo Quantique à cause du « problème de signe »).

Or, de part la nature des états de basse énergie qui apparaissent sur ces systèmes (absence d'ordre de spin voire liquides de spins, liquides de dimères), il s'est avéré fructueux d'étudier ces problèmes dans une base réduite et variationnelle, celle des états de « liens de valence résonnants à courte portée » (SRRVB, « Short Range Resonating Valence Bond »). Cette technique, qui a permis initialement d'étudier avec succès le hamiltonien de Heisenberg sur le réseau kagomé, est en fait applicable à tous les systèmes où la frustration intervient de façon significative (qu'ils soient dopés ou non).

La méthode mise au point dans notre équipe au LPT permet de résoudre les difficultés spécifiques dues au caractère variationnel et non-orthogonal de cette base.

3. Groupe de Renormalisation par la Matrice Densité

La méthode du Groupe de Renormalisation par la Matrice Densité (DMRG en anglais), est une méthode complémentaire de la méthode de diagonalisation exacte qui permet d'obtenir les fonctions de corrélations statiques de systèmes finis de tailles plus importantes (typiquement des chaînes de 500 à 1000 sites avec des conditions aux bords ouvertes).

4. Monte Carlo Quantique

Bien que les simulations Monte Carlo se heurtent à l'apparition, pour certains modèles, de probabilités de transition *négatives*, elles permettent de traiter des systèmes plus grands que les diagonalisations exactes jusqu'à des températures relativement basses. Ces méthodes sont donc, elles aussi, complémentaires de la méthode de Lanczos. Au cours des dernières années, un réseau de collaborations très utiles avec des experts de Monte Carlo Quantique (W. Hanke à Würzburg, groupe de Tallahassee, groupe de D.J. Scalapino à Santa Barbara, A.W. Sandvik à Turku & BU-Boston, etc.) a été mis en place.

Les algorithmes de Monte-Carlo quantiques que nous utilisons sont essentiellement de deux types :

- L'algorithme « Stochastic Series Expansion » (SSE) introduit par A.W Sandvik permet de simuler très efficacement les systèmes de spins et de bosons de cœurs durs en l'absence de problème de signe.
- L'algorithme dit « déterminantal » est utilisé pour la simulation de modèles fermioniques. Dans certains cas, l'absence de problème de signe permet l'étude à grande échelle de ces systèmes.

5. Renormalisation dans l'espace réel

Construction d'hamiltoniens effectifs: méthode CORE

Les techniques de renormalisation dans l'espace réel permettent en principe de construire un Hamiltonien effectif agissant dans un espace tronqué mais reproduisant *exactement* le spectre de basse énergie. Dans de nombreux cas, cet Hamiltonien effectif peut être approximé et calculé en étudiant de petits systèmes (cf. figure 2.2). S. Capponi *et al.* développent cette méthode pour résoudre des réseaux de spins frustrés, ainsi que pour obtenir le modèle fermion-boson qui reproduit très bien le diagramme de phase des composés supraconducteurs à haute température critique.

Décimation dans les systèmes magnétiques avec désordre à 1D et 2D

Les systèmes magnétiques avec désordre dans les couplages peuvent être traités par une technique de renormalisation dans l'espace réel. En généralisant la technique de décimation précédemment appliquée au modèle AF 1D désordonné (pour lequel il existe une solution analytique), le cas des systèmes non purement linéaires ou possédant un mélange de couplage AF et ferro peut être abordé par une approche numérique.

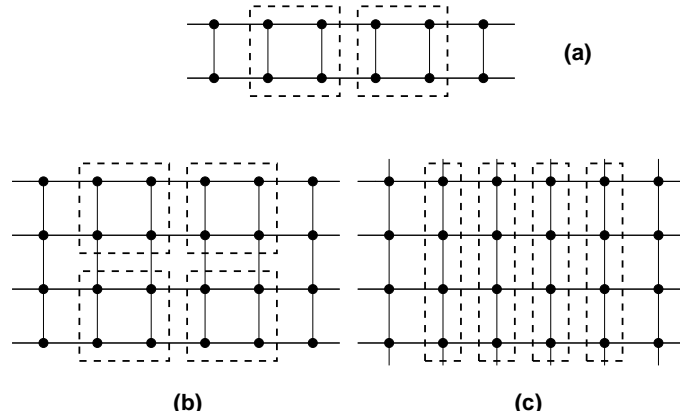


FIG. 2.2 – Illustration du découpage en sites effectifs (ici correspondant à des plaquettes ou des barreaux de 4 sites du réseau initial de type « échelle ») utilisé dans la méthode CORE de construction d'un hamiltonien effectif de basse énergie. D'après la référence [9].

2.1.4 Quelques résultats scientifiques récents

La modélisation de ces systèmes corrélés et l'utilisation de méthodes numériques pour étudier ces modèles et confronter les résultats à l'expérience, a permis de faire des progrès très importants dans la compréhension des propriétés physiques des matériaux.

A l'aide de diagonalisations exactes par exemple, une analyse de taille finie permet d'obtenir des informations fiables sur la limite thermodynamique. L'étude des propriétés dynamiques de ces modèles (par ex. fonctions spectrales, conductivité optique), a constitué une part importante de notre travail. Ces calculs permettent une confrontation directe des prédictions des modèles théoriques avec les données expérimentales.

Signalons aussi que d'autres méthodes numériques comme le DMRG (dans le cas de systèmes quasi-1D) ou le Monte Carlo Quantique (dans le cas de systèmes 1D ou magnétiques non frustrés) se sont avérées complémentaires et essentielles dans nos études.

1. Impuretés dans les chaînes spin-Peierls [12,18]

- Dans le cadre de la thèse de N. Laflorencie, des progrès importants ont été réalisés au niveau de la compréhension des mécanismes complexes conduisant à la formation de moments magnétiques localisés (confinement) par dopage avec des impuretés non-magnétiques et la mise en ordre antiferromagnétique à basse température. Malgré la frustration magnétique existant dans CuGeO_3 , une simulation Monte Carlo à grande échelle a pu être menée grâce à la construction d'un modèle effectif décrivant l'interaction magnétique entre dopants. L'étude, par des méthodes de renormalisation dans l'espace réel, d'un régime de loi d'échelle bi-dimensionnel découvert dans le cadre de ce modèle est en cours.

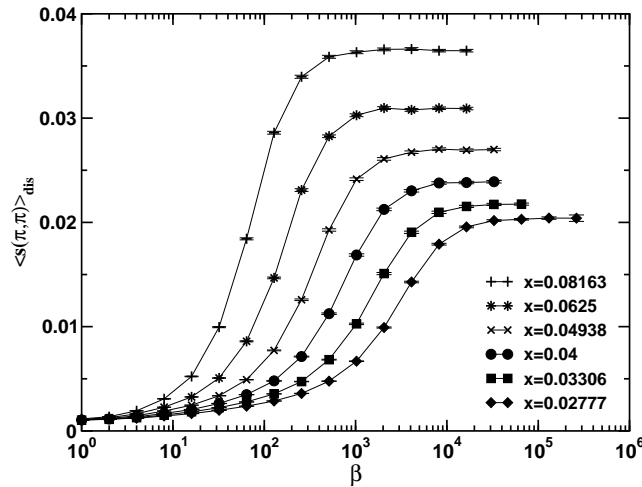


FIG. 2.3 – Simulations Monte Carlo Quantique à très basse température d'un système 2D de chaînes spin-Peierls couplées et dopées par des ions non-magnétiques : aimantation alternée (traduisant l'apparition d'un ordre antiferromagnétique à $T = 0$) en fonction de la température inverse $\beta = 1/T$ et moyennée sur ~ 2000 réalisations du désordre. Résultats pour $N_s = 256$ spins sur réseaux de tailles 56×56 , 64×64 , 72×72 , 80×80 , 88×88 et 96×96 (de haut en bas) correspondant aux concentrations x indiquées sur la figure. D'après la référence [12].

2. Échelles de spins dopées et supra non conventionnelle [8,14,15]

- Un travail en collaboration avec K. Tsutsui, post-doc au laboratoire, a montré l'émergence de **fluctuations de courant** associées à la disparition du gap de spin. Ces fluctuations de courant pourraient être reliées à la proximité d'une phase dite « D-density wave » (DDW) en **compétition avec la supraconductivité** et responsable du pseudo-gap dans les cuprates supraconducteurs.
- Un effort particulier a été fait récemment pour comprendre l'effet de l'introduction d'**impuretés de Lithium** en collaboration avec le groupe de T. M. Rice (ETH Zürich). Le cas du Lithium est particulièrement intéressant car, contrairement à la substitution du Cuivre par du Zinc, la substitution par du Lithium induit un dopage intrinsèque (en raison de la différence de valence entre Lithium et Cuivre). Un tel problème peut être décrit en considérant une lacune dans un réseau antiferromagnétique. Le trou libéré dans le processus de substitution (Li^+ vs Cu^{2+}) est soumis à un potentiel Coulombien attractif et est localisé au voisinage de l'impureté.
- L'utilisation de la **méthode CORE**, développée par S. Capponi s'est révélée très performante pour étudier les corrélations de charges dans des échelles. En particulier, nous avons pu mettre en évidence des **corrélations dynamiques de type « rubans »** (« stripes » en anglais) dans un système avec conditions aux limites périodiques, c'est-à-dire respectant l'invariance par translation du réseau.

- En collaboration avec D.J. Scalapino, un projet important a porté sur l'étude de la **dépendance en fréquence du gap supraconducteur** dans les échelles ou en géométrie 2D. A l'aide d'une expression simple, ce dernier peut être obtenu directement par un calcul numérique de la fonction de Green supraconductrice. Les résultats permettent de mieux comprendre **le rôle des fluctuations de spins dans le mécanisme d'appariement** ainsi que les processus de retard.
- Grâce à une analyse théorique par la technique de bosonisation faite avec E. Orignac, nos données peuvent être interprétées afin d'en extraire les échelles d'énergies du problème. Nous pouvons également calculé la dépendance en impulsion de ce gap supraconducteur, ce qui nous renseigne sur la structure interne d'une paire élémentaire ainsi que sur sa dynamique. Cette approche pourrait être systématiquement appliquée à d'autres modèles censés décrire la supraconductivité non conventionnelle.

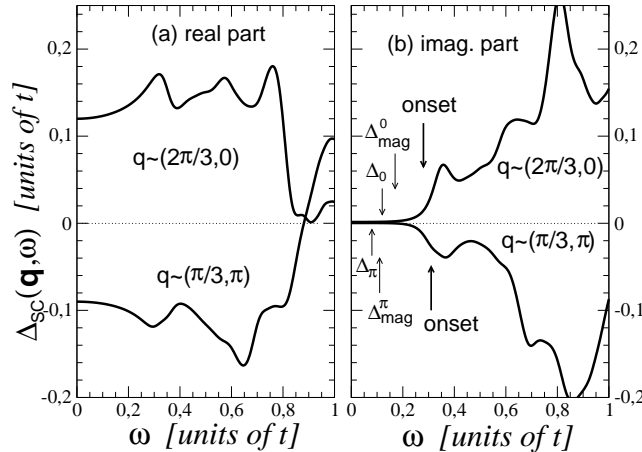


FIG. 2.4 – Parties réelle et imaginaire du gap supraconducteur (en fonction de la fréquence ω et pour les deux vecteurs d'onde de Fermi) d'une échelle de spin à 2 montants à dopage $1/8$ modélisée par un hamiltonien t - J . Les excitations de quasiparticules et de type magnon sont indiquées par des flèches sur la figure (b). D'après la référence [15].

3. Excitations dans une chaîne de spins dopée [13]

- En collaboration avec le groupe du Pr. Muramatsu à Stuttgart, nous avons étudié la fonction spectrale d'une chaîne de spins ayant un dopage fini. En particulier, la description des modes de basse énergie peut se faire à partir de quelques excitations élémentaires (spinon, holon et antiholon) par analogie avec des modèles intégrables connus.

4. Manganites à magnéto-résistance colossale [16]

- Étude du diagramme de phase et de la séparation de phase dans le modèle de Kondo ferromagnétique. Mise en place sur ce thème d'une collaboration ECOS avec, en particulier, M. Avignon (LEPES, Grenoble), J. Riera (Rosario, Argentine) et C. Batista (Bariloche, Argentine). Des études complètes ont été effectuées dans le régime de fort dopage où nos méthodes numériques se révèlent particulièrement efficaces.
- D'autre part, dans le cadre de la thèse de D. Magnoux, à l'aide d'un modèle de type double-échange (spins localisés traités classiquement) incluant le couplage aux distortions coopératives Jahn-Teller du réseau, nous avons étudié le diagramme de phase d'un manganite $1/2$ -rempli (comme $\text{La}_{1/2}\text{Ca}_{1/2}\text{MnO}_3$) en fonction de l'ensemble des paramètres ainsi que le rôle capital du désordre.

5. Mise en évidence d'un liquide de spin $\text{SU}(4)$ [21]

- Dans certains oxydes les électrons localisés interagissant via le terme d'échange $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ peuvent occuper deux orbitales. L'interaction devient alors plus complexe et cette dégénérescence orbitale donne lieu à des comportements typiques de ces systèmes. De façon générique, l'interaction est du type $f(\vec{S}_i, \vec{S}_j)g(\vec{\tau}_i, \vec{\tau}_j)$ où $\vec{\tau}$ est un opérateur de pseudo-spin représentant le

degré de liberté orbital. Les mécanismes mis en jeu par le couplage entre ces degrés de liberté sont en général non triviaux et encore non élucidés : sauf dans le cas de couplages très dissymétriques entre les parties spin et orbitale, l'approche de champ moyen est typiquement inefficace même au niveau qualitatif. En particulier lorsque le couplage est le plus symétrique, on obtient le modèle $(2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + 1/2)(2\vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + 1/2)$ dont le groupe de symétrie n'est plus simplement $SU(2) \times SU(2)$ mais est plus général : c'est le modèle $SU(4)$. L'intérêt de ce modèle est qu'il recèle sans doute les propriétés les plus significatives de ce type d'oxydes où l'approche de champ moyen est manifestement en échec.

- Le modèle $SU(4)$ $J_1 - J_2$ sur le réseau triangulaire exhibe des propriétés intéressantes et variées en fonction de J_2/J_1 . On assiste, quand ce paramètre augmente, à une modification de la nature du fondamental et de la tour des excitations : le système passe d'un état désordonné de type liquide à un état montrant un ordre à plusieurs sous-réseaux.

6. Impuretés statiques dans un liquide de spin [22]

Nous avons considéré les effets du dopage par des impuretés statiques du réseau kagomé. Nous avons montré que les impuretés diminuent le nombre d'états singulets de base énergie, occasionnent l'apparition de corrélations dimère-dimère sur des échelles spatiales assez importantes et n'engendrent pas de moments locaux libres dans leur voisinage. De manière encore plus étonnante, on observe une *interaction effective répulsive*, conséquence hautement non conventionnelle de la frustration du modèle de spin sous-jacent.

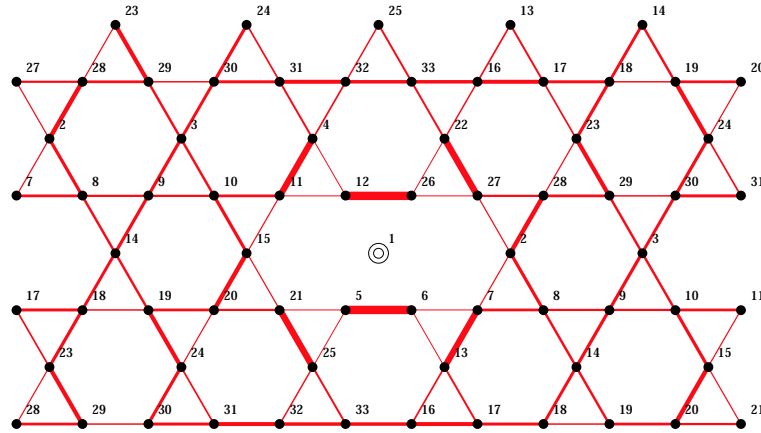


FIG. 2.5 – Fonctions de corrélation de spin autour d'une impureté statique (site 1) sur le réseau kagomé (cf. référence [22]) montrant l'apparition d'un ordre local de dimères. L'épaisseur des traits est proportionnelle à l'intensité de la fonction de corrélation $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ (ici négative) et donc à la probabilité de trouver un dimère sur le lien (i,j) . La généralisation au cas d'un trou mobile a été également étudiée dans [24].

7. Propriétés dynamiques des trous dans les liquides de spins et les systèmes magnétiques frustrés [24]

Le calcul de la fonction spectrale d'un trou dans divers réseaux frustrés 2D (damier, kagomé & triangulaire) montre que la séparation spin-charge est favorisée dans un état liquide de spins sans brisure de symétrie alors que le confinement holon-spinon est générique d'un cristal de liens de valence.

8. Chaîne AF avec échange aléatoire [17]

Une analyse fine des effets de taille finie a été réalisée dans la chaîne AF désordonnée et a mis en évidence un cross-over entre deux phases gouvernées respectivement par un point fixe pur et un point fixe de désordre infini.

2.1.5 Perspectives en théorie de la matière condensée

Un renforcement de cette activité dans les domaines suivants est envisagé:

1. Conducteurs organiques de basse dimensionnalité

Nous projetons d’approfondir l’étude de la coexistence des phases Onde de Densité de Charge ou de Lien et de la phase Spin-Peierls en incluant les effets électrostatiques des anions *et* le couplage magnétique inter-chaîne.

2. Supraconductivité non conventionnelle: échelles de spins dopées et liquides de spins dopés

Un projet en cours concerne la dynamique de spin échelles supraconductrices et l’étude analytique (bosonisation) et numérique des modes magnétiques résonnants qui pourraient être mis en évidence par diffusion inélastique de neutrons. Les similitudes et les différences avec le mode dit « à 41 meV » dans les cuprates sous-dopés pourrait apporter des renseignements précieux sur le mécanisme de la supraconductivité et de la relation avec le magnétisme. Il est aussi prévu de poursuivre les études par **modèle effectif** (CORE) dans les échelles de spins dopées ou à 2D, par exemple dans le cas des réseaux pyrochlore et kagomé *dopés* (cf. ci-dessous) afin d’explorer la possibilité d’appariement de trous et de phases supraconductrices exotiques. Finalement, l’étude du **gap supraconducteur** (en fonction de la fréquence et de l’impulsion) sera étendu au cas des échelles de Hubbard où il est possible de faire varier l’anisotropie des couplages d’échange entre les montants et les barreaux.

3. Propriétés dynamique des trous dans les liquides de spins et les systèmes magnétiques frustrés

Nous projetons d’étendre ces études au cas d’un dopage fini. La recherche de phases supraconductrices non conventionnelles (cf. les cobaltites de structure triangulaire) est une des motivations fortes pour entreprendre cette étude. La méthode CORE devrait se révéler complémentaire des méthodes de type Lanczos pour mener à bien ce projet.

2.2 Physique statistique des systèmes complexes

Équipe (permanents): P.-H. Chavanis, D.S. Dean, N. Destainville, S.N. Majumdar & C. Sire

2.2.1 Turbulence 2D et mécanique statistique des tourbillons

Chercheur: P.-H. Chavanis

La turbulence bidimensionnelle présente la propriété remarquable de s’organiser spontanément en structures cohérentes, des tourbillons persistants qui dominent la dynamique de l’écoulement. Ces tourbillons sont relativement fréquents dans les écoulements géophysiques ou astrophysiques de grande envergure avec le célèbre exemple de la Tache Rouge de Jupiter ou bien les cyclones et anticyclones souvent observés dans l’atmosphère terrestre et dans les océans (cf les bulletins météorologiques). Pour rendre compte de ce phénomène, une théorie statistique initiée par Onsager en 1949 avec un modèle de tourbillons ponctuels a été généralisée par J. Miller, R. Robert et J. Sommeria au cas de champs de vorticités continus. Dans cette approche, les tourbillons organisés sont interprétés comme des structures d’entropie maximale, i.e. comme les états les plus probables parmi tous les états possibles. La théorie statistique d’équilibre est désormais bien comprise même si ses prédictions sont parfois limitées à cause d’effets de dissipation visqueuse (inhérents aux simulations numériques actuelles) et d’ergodicité seulement partielle. Au niveau théorique, des extensions possibles de la théorie concernent son application à des situations géophysiques et le développement de la théorie cinétique qui lui est associée.

Mécanique statistique de la turbulence bidimensionnelle: applications géophysiques

P.-H. Chavanis et J. Sommeria ont récemment généralisé la mécanique statistique de l’équation d’Euler 2D incompressible au cas des équations « shallow water » (décrivant un fluide de faible épaisseur) plus appropriées à un contexte géophysique [29]. En particulier, ce modèle prend en compte des effets de compressibilité qui sont indispensables pour décrire des grandes structures tourbillonnaires comme la Tache Rouge de Jupiter. Ils se sont limité pour l’instant à élaborer le cadre formel de la théorie mais leur travaux fournissent un modèle opérationnel pour passer à des applications concrètes (en cours avec F. Bouchet). En particulier, il est possible de décrire la structure annulaire de la tache rouge de Jupiter en développant une analogie avec mur de domaines (« domain wall » en anglais).

Dynamique et thermodynamique des tourbillons bidimensionnels

A cause des effets non idéaux mentionnés plus haut, et de la méconnaissance des conditions initiales en pratique, il est souvent difficile de *prédire* l'état d'équilibre atteint par le système sous l'effet d'une relaxation violente. On est donc ramené à construire des solutions particulières de l'équation d'Euler (ou de ses variantes en géophysique) pour *reproduire* les observations. Comme ces états d'équilibre résultent d'un mélange très fort, il faut exiger que ces solutions soient non linéairement stables via la dynamique inviscide. La construction explicite de ces solutions est difficile en général. Cependant, il se trouve que le critère de stabilité dynamique non linéaire a une forme analogue au critère de stabilité thermodynamique usuel (maximisation de l'entropie de Boltzmann à masse et énergie fixées) mais pour une plus grande gamme de fonctionnelles appelées fonctions-H. En exploitant cette *analogie thermodynamique*, P.H. Chavanis [37,41] a introduit une équation de relaxation, ressemblant à une équation de Fokker-Planck généralisée, pouvant servir d'algorithme numérique physique pour construire n'importe quelle solution non linéairement stable de l'équation d'Euler 2D. Les applications de cette méthode, visant à une description et à une classification de toutes les solutions possibles, sont nombreuses.

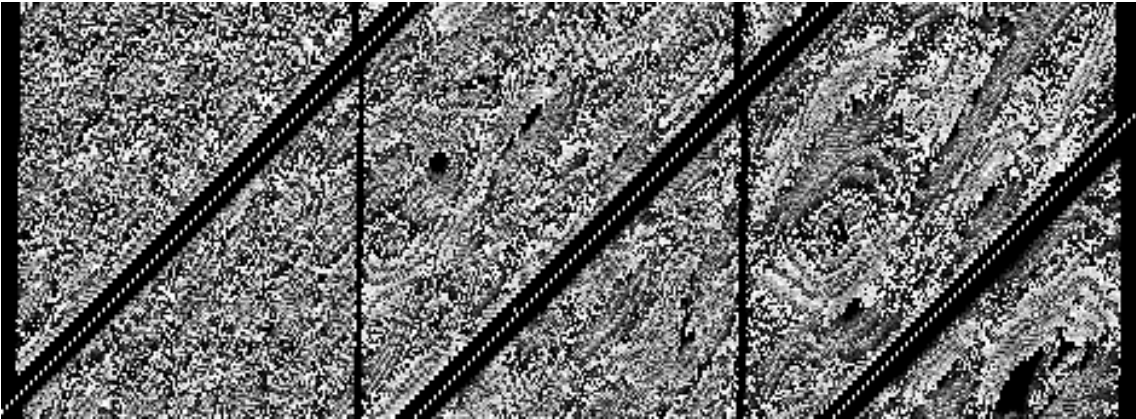


FIG. 2.6 – Dans cette expérience de Tabeling et collaborateurs réalisée à l'ENS de Paris, une fine couche d'eau salée est forcée par un réseau d'électro-aimants en un réseau bipartite vortex-antivortex (photo de gauche). Lorsque les aimants sont désactivés, le processus de déclin commence, caractérisé par la diminution du nombre de vortex $N(t) \sim t^{-\xi}$, et l'augmentation de leur taille typique $r(t) \sim t^{\xi/4}$. P.-H. Chavanis et C. Sire ont reproduits et expliqués les résultats de cette expérience en résolvant un modèle effectif introduit par Y. Pomeau et collaborateurs.

2.2.2 Mécanique statistique des systèmes auto-gravitants

Chercheur: P.-H. Chavanis

Les systèmes auto-gravitants suivent une sorte d'organisation révélée dans la classification de Hubble pour les galaxies ou dans des lois « universelles » qui décrivent des familles de systèmes gravitationnels (e.g., la loi $R^{1/4}$ de de Vaucouleurs pour les galaxies elliptiques, le modèle de Michie-King pour les amas globulaires, la décroissance en r^{-2} de la distribution de matière noire...). Il se trouve que de nombreux systèmes astrophysiques sont décrits par une fonction de distribution isothermale et le problème de la thermodynamique des systèmes auto-gravitants se pose donc naturellement. Peut-on, comme pour les tourbillons, interpréter les systèmes auto-gravitants comme des états d'entropie maximale? En fait, il se trouve que ces systèmes ont une thermodynamique assez particulière car il n'existe pas toujours d'état d'équilibre statistique: un système auto-gravitant peut évoluer d'une façon singulière en s'effondrant sur lui-même...

Instabilité gravitationnelle des sphères isothermes et polytropiques confinées

Dans une série d'articles sur le sujet, P.-H. Chavanis a cherché à décrire l'instabilité gravitationnelle des sphères isothermes. Des méthodes numériques générales pour analyser la stabilité des systèmes auto-gravitants (e.g., les étoiles) ont été développées depuis très longtemps mais elles n'avaient pas été appliquées explicitement à des sphères isothermes car leur masse est infinie et il est nécessaire de confiner

artificiellement le système dans une boîte! Si on s'autorise à recourir à cet artifice (qui peut être justifié par des arguments de relaxation incomplète), il est possible de conduire une étude *analytique* du problème de stabilité des sphères isothermes qui est par ailleurs d'une très grande richesse [26]. Cette étude généralise le problème classique de Jeans à une distribution *inhomogène* de matière (éliminant de fait l'arnaque de Jeans). On trouve alors une série d'échelles induisant l'instabilité gravitationnelle. Ces échelles suivent une progression géométrique (contrairement au modèle de Jeans homogène où l'échelle est unique) et on s'attend donc à ce qu'elles se fragmentent à leur tour en échelles plus petites... dans un processus qui est peut-être caractéristique d'une structure fractale. Ces études analytiques de stabilité ont été généralisées à des sphères isothermes en relativité générale (décrivant par exemple le cœur des étoiles à neutron) [27] et à des sphères polytropiques confinées [28].

Inéquivalence des ensembles thermodynamiques

La mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée est très riche mais elle a été peu étudiée jusqu'ici. Le beauté de ces systèmes vient de leur simplicité car le champ moyen est exact et le problème de la détermination des états d'équilibre revient à maximiser un potentiel thermodynamique (entropie, énergie libre, grand potentiel,...) sous des contraintes appropriées. Une caractéristique des systèmes avec des interactions à longue portée tient au fait que les ensembles statistiques ne sont pas équivalents à la limite thermodynamique et donc la stabilité du système dépend de l'ensemble dans lequel on travaille (lequel est fixé par le système physique considéré).

Dans le cadre de l'interaction gravitationnelle, P.H. Chavanis [36] a déterminé les limites de stabilité thermodynamique dans les ensembles canonique, grand canonique et grand microcanonique (énergie et potentiel chimique fixés) de manière analytique. Cette étude complète les travaux d'Antonov (1962), Lynden-Bell (1968) et Padmanabhan (1980) réalisés dans l'ensemble microcanonique. Cette étude a été réalisée pour l'entropie de Boltzmann et pour l'entropie de Tsallis. Dans le second cas, la maximization de l'entropie de Tsallis fournit soit une condition de thermodynamique généralisée (une notion qui peut être contestée ou du moins qui demande à être développée) soit, de manière plus pertinente, une condition de stabilité dynamique non linéaire via les équations de Vlasov-Poisson ou les équations d'Euler-Jeans-Poisson. Comme indiqué dans la section 2.2.1, il se trouve que le critère de stabilité dynamique non linéaire est *similaire* à un critère de stabilité thermodynamique généralisée.

Transitions de phase dans le gaz de Fermi auto-gravitant

Lorsqu'il n'existe pas d'état d'équilibre statistique, un système gravitationnel s'effondre sur lui-même. On peut étudier précisément les transitions de phase des systèmes auto-gravitants en introduisant une répulsion aux courtes distances en vue de régulariser le potentiel gravitationnel et d'identifier clairement une phase condensée. Une régularisation physique consiste à introduire un principe d'exclusion analogue au principe de Pauli en mécanique quantique. On est alors amené à étudier un gaz de Fermi auto-gravitant. Une analyse détaillée des transitions de phase pour ce système a été effectuée de manière numérique et analytique [31]. Cette étude peut avoir des applications dans des modèles de matière noire (en supposant qu'elle soit constituée de neutrinos massifs) et dans le contexte de la « relaxation violente » des systèmes auto-gravitants non collisionnels où le théorème de Liouville joue un rôle similaire au principe d'exclusion de Pauli.

Le gaz de Fermi auto-gravitant est extrêmement riche et présente des transitions de phase du premier ordre microcanonique et canonique, des plateaux de Maxwell verticaux et horizontaux, des points critiques microcanonique et canonique, des points spinodaux associés à des transitions de phase d'ordre zero (catastrophe gravothermale et collapse isotherme), des chaleurs spécifiques négatives en microcanonique, des phénomènes d'hysteresis (collapse/explosion) etc. Le diagramme de phase complet du gaz auto-gravitant régularisé a été obtenu dans [31,35,38]. Ces travaux montrent comment la courbe calorique classique ayant la forme d'une spirale se déroule sous l'effet de la régularisation quantique donnant lieu à ce qui a été appelé des « cous de dinosaures » [38].

Gas de Fermi auto-gravitant en rotation

L'étude précédente a été étendue par Chavanis & Rieutord [38] pour des systèmes auto-gravitants en rotation. Dans ce cas, un nouveau paramètre de contrôle intervient pour chiffrer la rotation. Il s'agit du moment angulaire dans la description microcanonique ou de la vitesse angulaire dans la description canonique. Dans une première approche perturbative, valide pour de faibles rotations, il a été trouvé de manière analytique que la rotation décale la catastrophe gravothermale vers des énergies plus grandes

(i.e., elle arrive plus tôt) alors que le collapse isotherme est décalé vers des températures plus basses (i.e., il arrive plus tard) [33].

Le cas d'une rotation quelconque a été étudié numériquement dans [38] en faisant l'hypothèse de la symétrie axiale. Dans la phase condensée, obtenue pour des faibles énergies et des faibles températures, le système a une structure en « cœur-halo ». Le cœur est similaire à un polytrophe d'indice $n = 3/2$ correspondant à un gaz de fermions complètement dégénéré. En l'absence de rotation, on a une « boule de fermions ». Pour de faibles rotations, la boule s'aplatit en une « sphéroïde ». Pour des rotations proches de la rotation keplerienne le système développe une *cusp* à l'équateur ou de la matière est expulsée par la force centrifuge. Nous avons souligné le fait que la séquence d'équilibre des fermions auto-gravitants en rotation ne bifurque pas continûment vers des structures non-axisymétriques (e.g. des systèmes binaires) contrairement à la séquence des systèmes auto-gravitants de densité uniforme.

2.2.3 Equations cinétiques généralisées et thermodynamique effective

Chercheur: P.-H. Chavanis

P.H. Chavanis a montré qu'il était possible de généraliser formellement les équations cinétiques et stochastiques usuelles de manière à ce qu'elles fassent croître une fonctionnelle plus générale que l'entropie de Boltzmann [37,40]. Ces équations ont soit une structure microcanonique (Boltzmann, Landau,...) où l'énergie est conservée et l'entropie (généralisée) croît ou bien une structure canonique (Fokker-Planck, Kramers, Smoluchowski,...) où la température est fixée et l'énergie libre (généralisée) décroît. Il en résulte une notion de thermodynamique généralisée effective qui peut avoir un grand nombre d'applications dans différents domaines de la physique, avec des interprétations différentes.

Concernant les solutions d'équilibre, on est amené à considérer les problèmes variationnels suivants:

$$\text{Max } S[f] \mid E[f] = E, M[f] = M \quad (\text{microcanonique}) \quad (1)$$

$$\text{Min } F[f] = E[f] - TS[f] \mid M[f] = M \quad (\text{canonique}) \quad (2)$$

où $S[f] = - \int C(f) d^D \mathbf{r} d^D \mathbf{v}$ joue le rôle d'une « entropie généralisée » (C est une fonction convexe quelconque). Les entropies de Boltzmann, Fermi-Dirac et Tsallis sont des cas particuliers de cette fonctionnelle. Dans le cas de systèmes avec des interactions à longue portée les deux problèmes variationnels cités plus haut ne sont pas équivalents (on parle d'inéquivalence d'ensemble en thermodynamique). Cela arrive lorsque la « courbe calorique » $\beta(E)$ présente des points tournants ou des bifurcations. L'étude générale des problèmes variationnels (1) et (2) est extrêmement riche. Comme nous l'avons vu précédemment, ils ont été étudiés en détail dans le cas de l'interaction gravitationnelle.

Ce formalisme de « thermodynamique généralisée effective » peut avoir plusieurs applications:

- **Cinétiques quantiques:** Un premier intérêt de ce formalisme est d'unifier la description des théories cinétiques classiques et quantiques. Par exemple, les équations de Boltzmann, Landau et Kramers adaptées aux fermions (incluant un terme $f \times (1 - f)$) peuvent se voir comme un cas particulier des équations générales proposées dans [37,40]. Il en est de même pour la statistique de Bose-Einstein et plus généralement pour les statistiques intermédiaires.
- **Milieux complexes:** Ces équations cinétiques généralisées peuvent se voir comme des équations « effectives » servant à décrire des milieux complexes où l'on n'a pas accès à toute l'information physique. Elles peuvent modéliser de façon heuristique des « contraintes cachées » ou difficiles à formaliser. Ces contraintes microscopiques sont souvent responsables de diffusion anormale. Cette diffusion anormale peut être prise en compte de manière heuristique en introduisant des coefficients de diffusion dépendant de la densité. Cela conduit à des notions d'entropies généralisées car tous les microétats accessibles (i.e. ayant la bonne valeur de l'énergie) ne sont pas équiprobables.
- **Particules de Langevin en interaction:** Il est possible d'écrire des processus stochastiques multiplicatifs conduisant à des équations de Fokker-Planck plus générales que celles étudiées habituellement. Ces processus ont été étudiés en connexion avec l'entropie de Tsallis qui se trouve être associée à l'équation de Fokker-Planck non linéaire. En fait, il est possible de généraliser ces processus stochastiques de façon à obtenir une nouvelle classe d'équations de Fokker-Planck associées à des entropies plus générales que celle de Tsallis. Ces équations peuvent ensuite être étendues à des particules en interaction. Les modèles résultants, qui décrivent des particules de Langevin en interaction, ont des propriétés physiques et mathématiques très riches. Une étude systématique de ces modèles a été entreprise dans [32,34,39,42].
- **Modèles chémotactiques généralisés:** L'agrégation chémotactique des bactéries se modélise en général par des équations de diffusion-dérive non-locales. Dans le cas le plus simple, le coefficient de diffusion est supposé constant. Dans des modèles plus réalistes, il peut dépendre de la concentration

bactérienne. De même, l'interaction entre les particules peut être relativement complexe. Dans ce contexte, les équations dynamiques généralisées proposées dans [37,40] peuvent servir de modèles chémo-tactiques généralisés.

• **Algorithmes de relaxation:** Comme on l'a vu précédemment, les principes variationnels (1) et (2) déterminent également la stabilité dynamique non linéaire des solutions stationnaires des équations de type Vlasov ou Euler (S est alors appelée une fonction H). On peut donc développer une *analogie thermodynamique* pour étudier leur stabilité dynamique. Dans ce contexte, les équations de Fokker-Planck généralisées proposées dans [37,40] peuvent servir d'algorithmes numériques physiques pour construire des solutions non linéairement stables de ces équations. Leur intérêt pratique est donc très important.

2.2.4 Particules browniennes auto-gravitantes

Chercheurs: P.-H. Chavanis et C. Sire

Nous avons étudié pour la première fois la dynamique et la thermodynamique d'un gaz de particules Browniennes auto-gravitantes. Il s'agit d'un modèle simplifié de particules en interaction gravitationnelle qui peut s'étudier en grand détail. Il généralise la théorie du mouvement Brownien introduite par Einstein, Smoluchowski... au cas où le champ de gravité n'est pas un champ extérieur mais est créé par les particules elles-mêmes. Dans la limite hydrodynamique (fortes frictions), nous sommes amenés à l'étude du système de Smoluchowski-Poisson. Dans le cadre de l'équation de Smoluchowski-Poisson, nous pouvons obtenir des résultats analytiques, même dans un volume fini, ce qui nous a permis de décrire la statique, ainsi que la dynamique du collapse gravitationnel.

Pre-collapse

Une caractéristique essentielle des systèmes auto-gravitants, et plus généralement des systèmes avec des interactions à longue portée, est la non équivalence des ensembles statistiques, par exemple microcanonique (où l'énergie E est strictement constante) et canonique. Pour les systèmes auto-gravitants, des états de chaleur spécifique négative apparaissent pour certaines gammes d'énergies dans l'ensemble microcanonique, ce qui est interdit dans l'ensemble canonique.

Dans l'ensemble microcanonique, et ceci de manière très générale (indépendamment du modèle plus ou moins simplifié utilisé), le système peut s'effondrer à assez basse énergie $E < E_c$ (« catastrophe gravotherme »), alors que le même phénomène se produit dans l'ensemble canonique à assez basse température $T < T_c$ (« collapse isotherme »). Dans les deux cas, l'effondrement se produit lorsque l'énergie cinétique n'arrive plus à contrebalancer l'effet de l'interaction attractive gravitationnelle. En pratique, l'effondrement se poursuit jusqu'à ce que les effets de dégénérescence (par exemple quantique pour des fermions) deviennent importants dans le cœur dense, ce qui interdit, en principe, une divergence réelle de la densité au cœur.

L'effondrement gravitationnel (à $E < E_c$ ou $T < T_c$) a été étudié numériquement par de nombreux auteurs, dans le cadre de modèles variés. Un scénario commun semble se dégager avec l'observation d'un effondrement en un temps fini t_* , où la densité obéit à une loi d'échelle du type

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_0 f(r/r_0), \text{ avec } \rho_0 r_0^\alpha = cste,$$

où la fonction d'échelle $f(r) \sim r^{-\alpha}$, à grand r , et où $r_0(t) \sim \sqrt{T(t)/\rho_0(t)}$ est le rayon de King qui caractérise la taille du cœur dense ($\rho_0(t) \sim (t_* - t)^{-\gamma}$, avec $\gamma = 1$, le plus souvent). $\alpha = 2$ dans le cas canonique ($T = cste$), et $\alpha \approx 2.2$ dans le cas microcanonique. Ces deux valeurs ont été reproduites dans le cadre de divers modèles théoriques, qui ne décrivent cependant pas la transition, car ils considèrent un volume infini contenant donc une masse elle aussi infinie, système pour lequel l'effondrement a toujours lieu.

Dans le cas de notre modèle de particules Browniennes auto-gravitantes, nous avons obtenu les résultats suivants:

- Nous avons démontré que l'instabilité dynamique conduisant à l'effondrement gravitationnel se produit à la même énergie E_c /température T_c que l'instabilité thermodynamique (absence de maximum local d'entropie/d'énergie libre). A noter qu'en dimension trois, la densité de cœur ne diverge pas à E_c ou T_c .
- Nous avons trouvé $\alpha_{can.} = 2$ dans le cas canonique, pour lequel nous avons pu calculer la fonction d'échelle $f(x)$ analytiquement. De plus, nous avons pu calculer les corrections à la densité qui n'obéissent pas à la loi d'échelle, et qui sont en pratique importantes, car elle contiennent une

fraction finie de la masse totale. De plus nous avons résolu exactement la dynamique à $T = 0$, qui conduit à $\alpha = 6/5$.

- Dans un premier temps (cf Sec. 2.2.4), nous avons trouvé $\alpha_{mic.} = 2.209733\dots$ dans le cas microcanonique, en très bon accord avec des simulations sur des systèmes/modèles plus réalistes, et avons calculé des développements asymptotiques de la fonction d'échelle f . Plus précisément, l'équation pour f admet une solution pour tout $2 \leq \alpha \leq \alpha_{mic.} = 2.209733\dots$, mais cette dernière valeur semble être privilégiée puisqu'elle correspond à une divergence maximale de l'entropie et de la température du système (par exemple $T(t) \sim (t_* - t)^{-(1-2/\alpha_{mic.})}$). En fait, le régime d'échelle avec $\alpha = \alpha_{mic.} = 2.209733\dots$ n'est observé que dans un régime intermédiaire. Nous avons montré que pour $\rho(0,t) \gg 10^5$ (soit $t_{coll} - t \ll 10^{-5}$), on retrouve un régime d'échelle avec α strictement égal à 2. Nous avons montré que si la température est imposée uniforme, celle-ci ne peut pas diverger à t_{coll} . Nous avons aussi montré que dans un modèle simple où la température pouvait varier spatialement, ce qui apparaît beaucoup plus réaliste, on retrouve à nouveau un régime d'échelle avec $\alpha > 2$, sélectionné de façon unique [39].
- Nous avons montré que le temps de corrélation τ (nécessaire pour atteindre l'équilibre au dessus de E_c ou T_c), diverge comme le temps d'effondrement près de E_c ou T_c : $\tau \sim t_* \sim \varepsilon^{-1/2}$ où $\varepsilon = |E - E_c|$ ou $|T - T_c|$ [32].
- Nous avons étudié le même système à deux dimensions [34]. En ce qui concerne la statique, nous avons reproduit la température critique exacte, ainsi que les exposants critiques déjà obtenus dans le cadre de la théorie conforme (dans l'ensemble canonique, car nous avons montré que la catastrophe gravotherme n'existe pas dans l'ensemble microcanonique en $d = 2$). Légèrement au dessus de T_c , nous avons montré que la densité vérifie une loi d'échelle du type $\rho(r,T) = \rho_0 f(r/r_0)$, avec $\rho_0 \sim r_0^{-2}$, et $r_0 \sim (T - T_c)^{1/2}$, ce qui implique que la densité de cœur diverge à T_c , contrairement à ce qui se passe en trois dimensions. f a été calculée analytiquement, par une analogie avec la théorie des champs de Liouville ($f(x) \sim x^{-4}$, à grand x). De plus, à T_c , la densité obéit à une loi d'échelle identique à celle mentionnée ci-dessus, mais où $\rho_0 \sim r_0^{-2}$ dépend du temps. Ainsi, dans des unités appropriées, la densité au cœur diverge comme $\rho_0 \sim c_1 \exp(c_2 \sqrt{t})$, où c_1 et c_2 sont des constantes universelles connues. Enfin, sous T_c , la densité est la somme de la solution à T_c avec un poids T/T_c , et d'une autre solution d'échelle avec un exposant apparent tendant très lentement vers 2 :

$$2 - \alpha(t) \sim \sqrt{\frac{2 \ln \ln \rho_0(t)}{\ln \rho_0(t)}}.$$

De plus, $\rho_0(t) \sim (t_* - t)^{-\alpha^{-1}(t)}$. Finalement nous avons résolu la dynamique exactement à $T = 0$.

- En dimensions $d > 2$ [34], le système se comporte qualitativement comme en dimension 3, avec $\alpha_{can.} = 2$ (f est aussi connue analytiquement). Dans le cas microcanonique, nous avons justifié analytiquement qu'il existe une solution pour la fonction d'échelle pour tous les $\alpha \in [2; \alpha_{mic.}]$. $\alpha_{mic.}$ est sélectionné dynamiquement, car cette valeur conduit à une divergence maximale de l'entropie. Nous avons trouvé $\alpha_{mic.} = 2 + \frac{1}{2}d^{-1} + \frac{11}{16}d^{-2} + O(d^{-3})$, ce qui donne une estimation de $\alpha_{mic.}$ en bon accord avec les simulations numériques en trois dimensions (voir ci-dessus). Nous avons montré que la nature de l'instabilité dynamique à T_c change qualitativement pour $d \geq 10$.

Post-collapse

Nous avons montré [42] que malgré la divergence de la densité à $t = t_{coll}$, l'évolution du système continue après le collapse. En effet, à $t = t_{coll}$, le cœur du système ne contient pas de masse car $\rho \sim r^{-2}$. Pour $t > t_{coll}$, il commence à accréter de la masse de sorte qu'un pic de Dirac croît au cœur du système alors que le profil de densité est « raboté ». Nous avons montré que le profil de densité en $r > 0$ décroît de manière auto-similaire tandis que la masse du pic de Dirac croît comme $M(t) \sim T^{d/2}(t - t_{coll})^{d/2-1}$ (et $M(t) \sim (t - t_{coll})^{d/2}$ à température nulle). Lorsque toutes les particules sont tombées dans la singularité centrale, le système est équivalent à un pic de Dirac contenant une masse totale M (« trou noir »). C'est précisément la prédiction de la mécanique statistique canonique. Nous avons montré que cet équilibre statistique était atteint durant le post collapse alors que la structure (singulière) formée à $t = t_{coll}$ est très différente. Cela résout un « paradoxe » soulevé dans un précédent article [32]. Ces résultats théoriques ont été confirmés par des simulations numériques. Enfin nous avons calculé à température finie le temps de relaxation de la dynamique à grands temps, quand presque toute la masse est absorbée au centre $\tau^{-1} = \frac{1}{4T} + \frac{c_s}{T^{1/3}} + \dots$

Particules de Langevin auto-gravitantes

Nous avons généralisé cette étude au cas de particules de Langevin auto-gravitantes subissant une diffusion anormale [39]. Nous avons décrit la thermodynamique de ces particules par l'entropie de Tsallis. Les états d'équilibres sont alors des polytropes auto-gravitants ayant la même structure que les polytropes stellaires et les polytropes gazeux. Nous avons étudié de manière exhaustive la structure et la stabilité de ces sphères polytropiques dans les ensembles microcanoniques et canoniques en dimension d . Cette étude théorique est extrêmement riche et présente plusieurs dimensions critiques $d = 2$, $d = 4$, $d = 2(1 + \sqrt{2})$ et $d = 10$ et indices polytropiques critiques $n_{3/2} = d/2$, $n_3 = d/(d - 2)$ et $n_5 = (d + 2)/(d - 2)$. Notre étude généralise celle exposée dans le monographe classique de Chandrasekhar (1939).

Nous avons ensuite étudié la dynamique et le collapse des particules de Langevin auto-gravitantes. Nous avons montré que le système pouvait soit relaxer vers un polytrope complet ou incomplet, soit subir un collapse gravitationnel. Nous avons montré que l'exposant caractérisant le collapse est $\alpha_n = 2n/(n-1)$. Pour $n \rightarrow +\infty$ (particules Browniennes), on retrouve la valeur $\alpha = 2$ obtenue précédemment [32].

Nous avons confirmé ces résultats théoriques par des simulations numériques. Nous avons montré que dans le cas microcanonique, l'exposant caractérisant le collapse était α_n , comme dans le cas canonique. Cependant, la convergence vers cette valeur est extrêmement lente et, en pratique, le système présente un exposant effectif intermédiaire entre α_{max} et α_n . C'est cet exposant effectif qui était mesuré dans nos précédentes simulations.

Nous avons finalement suggéré que ce modèle de particules de Langevin en interaction puisse avoir des applications dans le cas de la chemotaxis des populations de bactéries, lorsque les particules subissent une diffusion anormale.

2.2.5 Physique statistique des pavages aléatoires

Chercheur: N. Destainville

L'étude de la stabilité des alliages quasi-cristallins motive celle des pavages aléatoires, qui en sont des modèles microscopiques plausibles. Ces pavages sont constitués d'un nombre fini de types de tuiles élémentaires qui pavent l'espace ou le plan sans trous ni recouvrements. Les pavages étudiés sont des pavages de rhomboèdres ou de losanges. L'approche du sujet suivie par N. Destainville privilégie une stabilisation entropique de ces alliages, plutôt que purement énergétique. L'entropie trouve son origine dans des degrés de liberté microscopiques des pavages aléatoires, dits phasons localisés ou « flips » élémentaires. Les résultats présentés dans cette section s'inscrivent à la suite de travaux antérieurs et les complètent.

Dans une première approximation du problème, tous les pavages ont la même énergie et l'on calcule une entropie configurationnelle, N. Destainville, R. Mosseri et F. Bailly ont trouvé une formule sommatoire exacte pour compter les pavages de losanges d'un octogone centro-symétrique de taille quelconque [45]. D'autre part, M. Widom, R. Mosseri, N. Destainville et F. Bailly ont compté par une méthode numérique de type Monte Carlo les pavages de dimension trois d'un dodécaèdre rhombique ainsi que d'un octaèdre et ont pu ainsi avoir accès à leur entropie configurationnelle [46].

Dans ce même article [46], ils ont étudié les effets des bords fixes sur ces pavages tri-dimensionnels. Il se trouve en effet que dans de tels systèmes, les bords ont un effet *macroscopique* fort sur les pavages tout entiers, ce qui se traduit par le fait que les pavages à bords fixes ont une entropie inférieure à celle de leurs homologues à bords libres ou périodiques. Ils ont confirmé numériquement la conjecture suivante : à la limite de grande taille, le pavage est aléatoire et homogène à l'intérieur d'un octaèdre inscrit dans le dodécaèdre rhombique du bord, alors qu'il est périodique et « gelé » à l'extérieur de cet octaèdre. Le rapport entre entropies à bords fixe et à bords libre est alors un rapport de volumes de polyèdres extrêmement simple à calculer : il vaut $2/3$. Cet octaèdre est le pendant à trois dimensions du « cercle arctique » en deux dimensions.

2.2.6 Systèmes dynamiques discrets et systèmes complexes hors équilibre

Chercheur: N. Destainville

Dynamiques dans les espaces de pavages aléatoires

Les flips élémentaires, qui sont des degrés de liberté originaux des pavages aléatoires et des quasi-cristaux, peuvent avoir des conséquences elles aussi originales sur leurs propriétés dynamiques. D'une part, on s'attend à ce que ces flips induisent des mécanismes de diffusion propres à ces matériaux, même

si leur mise en évidence expérimentale reste délicate. D'autre part, un certain nombre de propriétés mécaniques des quasi-cristaux présagent de comportements de type *vitreux* dans ces alliages qui pourraient trouver leur source dans leurs propriétés dynamiques microscopiques. C'est pourquoi N. Destainville s'est intéressé aux propriétés des espaces de configurations en termes de flips élémentaires. Il a calculé des temps ergodiques – ou de mélange – dans ces espaces qui caractérisent à quelle vitesse le système explore son espace de configurations *via* un mécanisme de flips. Ces calculs ont là aussi été faits dans un premier temps dans l'approximation où toutes les configurations ont la même énergie ; dans ce cas-là, la dynamique est rapide : toutes les configurations sont susceptibles d'être explorées en un temps polynômial en la taille du système [49].

Minoration des gaps spectraux de chaînes de Markov : la technique de « multi-decomposition »

Après avoir étudié la dynamique des pavages aléatoires bidimensionnels, N. Destainville a montré que la méthode utilisée pouvait être généralisée à d'autres systèmes, en particulier à température finie. Il a donc formalisé cette technique de « multi-decomposition » dans un contexte général [50]. Elle permet de minorer efficacement les gaps spectraux de certaines chaînes de Markov sur des espaces de configurations finis, ou encore de majorer leur temps de retour à l'équilibre. Il s'agit d'une problématique omniprésente en physique statistique hors d'équilibre, aussi bien du point de vue théorique que numérique (si l'on veut par exemple savoir si un algorithme de Monte Carlo a de longs temps d'auto-corrélation ou pas).

Cette méthode a été appliquée avec succès [50] au « Backgammon model », qui constitue un paradigme pour les systèmes « vitreux ». Elle permet de comprendre rigoureusement pourquoi ce système est lent à température nulle : tout le caractère lent de la dynamique provient des temps longs où il ne reste plus que 2 urnes non-vides. D'autre part, N. Destainville a appliqué cette technique à un problème réputé difficile de théorie des probabilités, le « Problème des tables de contingences » muni de deux types de dynamiques. Dans ce cas, la méthode ne peut être menée analytiquement jusqu'au bout mais simplifie grandement le travail numérique, ce qui permet de conjecturer que la dynamique est rapide.

Le « Modèle des descentes », un modèle simple de système complexe hors d'équilibre

V. Desoutter et N. Destainville ont étudié un modèle simple de système dynamique discret qui présente des dynamiques lentes, le « modèle des descentes ». L'ensemble des configurations est le groupe des permutations S_n muni d'un hamiltonien adéquat. À température non nulle, la dynamique est rapidement mélangeante, alors qu'à température nulle, le système met un temps exponentiellement grand avec n pour atteindre sa distribution d'équilibre : le système est perpétuellement hors équilibre et on démontre analytiquement que l'énergie par particule décroît en $1/\ln(t)$, ce qui est bien compris en termes de barrières entropiques. En outre, ils ont prouvé par un argument très simple que le système montre du vieillissement.

2.2.7 Physique statistique et biologie

Chercheurs: D.S. Dean et N. Destainville

D.S. Dean et N. Destainville ont engagé depuis 1999 une collaboration avec Laurence Salomé et André Lopez, de l'Institut de Pharmacologie et de Biologie Structurale (IPBS-CNRS). En utilisant des données expérimentales acquises à l'IPBS, leur objectif est de caractériser le transport latéral membranaire de récepteurs biologiques spécifiques qui sont piégés dans la membrane de cellules vivantes. Ces récepteurs sont suivis avec une précision nanométrique en nano-video-microscopie après avoir été préalablement marqués (technique du « Suivi de particule unique »). L'objectif à terme est de relier leurs propriétés de transport à leur fonctionnalité biologique. Les récepteurs étudiés ont un comportement de type diffusif mais dans des domaines bornés de la membrane, qui eux-mêmes sont déformables et mobiles. Ce confinement favorise les interactions entre protéines et accélère la réponse de la cellule à un signal chimique extérieur. Un certain nombre de mécanismes ont déjà été compris, et il a été montré que le confinement n'est pas dû à des barrières rigides dues au cytosquelette au voisinage de la membrane, comme cela était communément admis, mais aux interactions à longue portée entre protéines membranaires [52,141].

Afin de comprendre plus en détail ces mécanismes, l'étape suivante consiste à travailler sur des membranes modèles, c'est-à-dire des bicouches lipidiques pures dans lesquelles sont incluses « à la main » des protéines. Une problème ouvert qu'il s'agit d'élucider est le comportement de la constante de diffusion microscopique des récepteurs en fonction de leur concentration. Outre son intérêt théorique fondamental,

il est indispensable de connaître ce résultat pour affiner la théorie précédente. Ces expériences sur les membranes modèles sont en cours à l'IPBS et seront confrontées à des modèles numériques et théoriques.

Cette collaboration est actuellement soutenue financièrement par une ACI du Ministère de la Recherche : « Interface physique, chimie, biologie : dynamique et réactivité des assemblages biologiques ».

2.2.8 Applications de la physique statistique à l'Informatique

Chercheurs: S.N. Majumdar et D.S. Dean

Les techniques de physique statistique ont été précédemment utilisées dans les sciences informatiques dans le cadre de l'étude de problèmes d'optimisation, de correction d'erreurs,... Récemment, ces techniques ont été étendues à deux nouveaux domaines, en commençant par les problèmes de tri et de recherche de données. Quand de nouvelles données arrivent, l'ordinateur trie ces données et les arrange afin de minimiser le temps de recherche futur. L'efficacité de l'algorithme de tri et recherche est quantifiée par le temps moyen t_{rech} nécessaire afin de retrouver un élément typique de la liste de taille N . Les meilleurs algorithmes satisfont $t_{rech} \sim c \log(N)$, pour des grands N . Il est donc primordial de savoir déterminer la constante c et éventuellement de trouver l'algorithme la minimisant. Des bornes sur c avaient été obtenues par les informaticiens dans le cas d'algorithmes de tri utilisant des arbres binaires. En reliant ce problème au système physique du polymère dirigé, S. Majumdar a déterminé c exactement, et a même pu calculer la forme asymptotique de la probabilité pour que $t_{rech} > x$: $P(t_{rech} > x, N) = f[x - c \log(N)]$. Si on interprète $\log(N)$ comme un temps, le problème se réduit à celui d'un front d'onde se propageant à vitesse c . Cette relation avec les problèmes de front d'onde a permis d'obtenir des résultats analytiques dans le cadre d'algorithme plus généraux, dont certains demeuraient insolubles depuis vingt ans [54,66].

Une autre application dans le domaine de l'informatique est le calcul du nombre de nœuds dans un m -arbre de recherche. Chaque génération d'un m -arbre possède m branches, et le cas $m = 2$ correspond à l'arbre binaire le plus utilisé. Le nombre de nœuds nécessaire afin d'enregistrer une nouvelle donnée est une observable importante. Pour des données aléatoires, ce nombre de nœuds $X_m(N)$ est une variable aléatoire, où N est la taille de la liste de données. On trouve que $\langle X_m(N) \rangle \sim N$ pour tout m , alors que la variance présente une transition de phase en fonction de m . Ainsi, pour $m < 26$, la variance $\sigma^2(N) = \langle X_m^2(N) \rangle - \langle X_m(N) \rangle^2 \sim N$, alors que pour $m > 26$, $\sigma^2(N) \sim N^{2\theta}$, où $\theta(m)$ est un exposant non trivial. S. Majumdar a expliqué l'origine de cette transition et a déterminé $\theta(m)$ analytiquement. De plus cette transition est générique, et apparaît aussi si les données forment un vecteur d -dimensionnel, pour une dimension $d_c = \pi/\sin^{-1}(1/2\sqrt{2}) = 8.69\dots$, et un exposant $\theta = 2 \cos(2\pi/d) - 1$ [57].

Il a été aussi montré que l'algorithme LHP, communément utilisé en informatique pour stocker des données possédant une adresse préassignée peut être interprété comme un problème de percolation corrélée. Dans ce modèle, une particule est déposée sur un substrat, et diffuse tant qu'elle reste sur un site occupé. Au fur et à mesure que le nombre de particules déposées augmente, les agrégats de particules finissent par percoler à une densité critique. Ce modèle représente une nouvelle classe d'universalité et a été résolu exactement en une dimension [58].

Le problème de la DLA (diffusion limitée par l'agrégation) est un problème classique non encore résolu. Le problème de la DLA sur le Bethe Lattice, étudié numériquement par Bradley et Strenski, est non trivial et a été résolu. Ce problème est formellement équivalent au DST (digital search tree) en informatique, et ces deux problèmes ont donc été résolu par des méthodes de front d'onde, conduisant à une percée significative pour les algorithmes de compression [69].

2.2.9 Persistance

Chercheur: S.N. Majumdar

La persistance est la probabilité pour un signal temporel de rester au-dessus d'un niveau donné. Ce thème a été développé au LPT depuis 1995 par S.M. Majumdar et C. Sire.

En pratique, la persistance est mesurée en des points discrets, bien que le processus temporel considéré soit en général continu en temps. Il a été montré que la persistance mesurée en des temps discrets est en général différente de son analogue continue, et il a été calculé analytiquement comment la persistance discrète converge vers sa valeur continue [55,61].

S. Majumdar et al. ont étudié la persistance de la magnétisation d'une sous-variété de dimension d' (probabilité que cette aimantation ne change jamais de signe) d'un système de spins en dimension $d > d'$ refroidi à sa température critique. Il y a trois régimes asymptotiques différents : exponentielle, exponentielle étirée, et loi de puissance, ces trois régimes étant gouvernés par la valeur du paramètre $\zeta = (D - 2 + \eta)/z$, où $D = d - d'$, et η et z sont des exposants critiques du modèles de spin. Par exemple,

cette approche prédit que la persistance d'une ligne décroît en loi de puissance à deux dimensions. En trois dimensions, la persistance d'un plan décroît en loi de puissance alors que la persistance d'une ligne décroît en exponentielle étirée, des résultats confirmés par les simulations [68].

Enfin, en collaboration avec le groupe de Maryland, S. Majumdar et al. ont pu expliquer théoriquement certaines anomalies pour la persistance observées dans la fluctuation des marches à l'équilibre d'une surface de Si (111) [72].

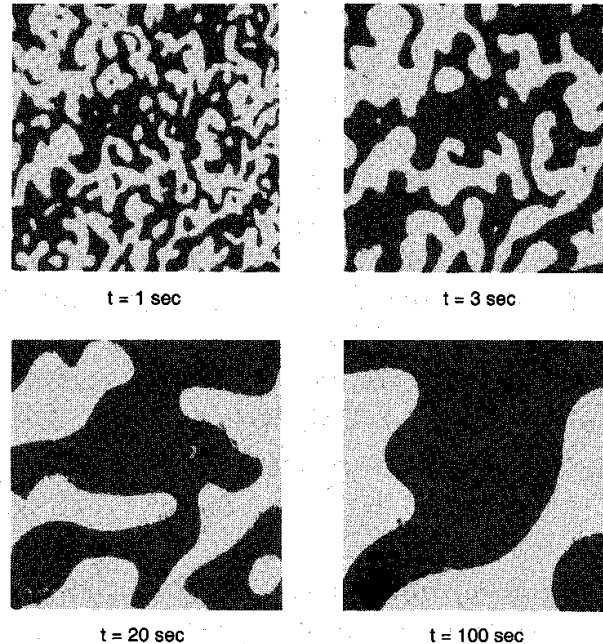


FIG. 2.7 – Quatre stades de l'évolution d'hélices de cristaux liquides nématiques visualisés en lumière polarisée, ce qui permet de différencier les deux sens possibles de rotation des hélices (Yurke et al.). Ce système est dans la classe d'universalité du modèle d'Ising 2D à $T = 0$. La croissance de l'échelle typique des domaines ($L(t) \sim t^{1/2}$) est clairement visible, et les quatre figures sont statistiquement identiques à un changement d'échelle de facteur $L(t)$ près (invariance d'échelle). L'exposant d'auto-corrélation temporelle mesuré est $\lambda_{\text{exp}} \approx 1.25$, à comparer avec la valeur théorique $\lambda_{\text{th}} = 1.286 \dots$. De même, l'exposant théorique de persistance calculé par S.M. Majumdar et C. Sire est en parfait accord avec la valeur expérimentale $\theta_{\text{exp}} \approx 0.19$. Enfin, S.M. Majumdar et A.J. Bray ont prédit que la persistance de la magnétisation d'une ligne décroît en loi de puissance à T_c .

2.2.10 Applications des processus stochastiques aux systèmes purs et désordonnés

Chercheurs: S.N. Majumdar et D.S. Dean

Les processus stochastiques apparaissent naturellement dans des domaines aussi variés que la physique, la biologie ou la finance. Dans des systèmes à grand nombre de degrés de liberté hors d'équilibre, il est souvent possible de se restreindre à l'étude de la dynamique d'un ou de quelques observables. Par exemple, pour le modèle d'Ising brutalement refroidi à température nulle, on peut observer la dynamique d'un spin du réseau. Comme discuté ci-dessus, la persistance de ce signal temporel représente l'une des mesures pertinentes pour la description du système. D'autres quantités intéressantes sont le temps local (fraction du temps passé dans un état de spin), ou le temps d'occupation (fraction du temps ou le processus reste positif). L'étude de ces quantités est très importantes dans des domaines tels que la finance ou l'étude de fluctuations des conditions climatiques.

Le calcul de ces quantités, un problème notoirement difficile, a pu être accompli pour une classe de processus de Markov (gaussiens et non gaussiens) en reliant ce problème à l'étude d'un système quantique [56,59,60,62,63,64,65,74].

Temps local et d'occupation ont aussi des applications importantes pour les systèmes désordonnés. Récemment, la distribution de ces objets a été calculée pour une particule dans un potentiel aléatoire, ce qui

a des applications importantes pour la localisation des défauts dans les images de systèmes désordonnées.

En collaboration avec A.J. Bray, S. Majumdar a obtenu des résultats exacts pour un système de particules diffusant et s'annihilant lorsqu'elles se rencontrent. Le calcul de la probabilité de survie d'une particule test a été résolu à grands temps, en montrant que ce problème à N corps pouvait se ramener à un problème à une particule, où le processus a maintenant des corrélations temporelles [67,70].

2.2.11 Modèles de croissance aléatoires et matrices aléatoires

Chercheur: S.N. Majumdar

En collaboration avec S. Nechaev, S. Majumdar a calculé la distribution asymptotique des hauteurs d'un modèle balistique de déposition en reliant ce système au problème de Ulam consistant à trouver la plus longue séquence croissante dans une séquence d'entiers. En utilisant les résultats connus pour le problème de Ulam, la distribution des hauteurs obtenue est la distribution de Tracy-Widom qui apparaît dans la théorie des matrices aléatoires près du bord du spectre. Ce résultat supporte la conjecture que les modèles de croissance en dimension $(1+1)$ qui appartiennent à la classe d'universalité KPZ partagent la même distribution universelle des hauteurs, la distribution de Tracy-Widom [73].

2.2.12 Transitions de phases dynamiques

Chercheur: C. Sire

On observe dans de nombreux systèmes dynamiques étendus une transition entre une phase active et une phase inactive lorsqu'on modifie un paramètre externe. L'exemple le plus connu de ce type de systèmes est la percolation dirigée où un fluide se propage dans une direction (assimilée au temps t) dans un réseau (par exemple carré incliné à 45°) où seulement une fraction x des liens laisse passer le fluide (liens actifs). Lorsque $x < x_c$, la densité $\rho(t)$ du fluide à la distance t de la région d'injection décroît exponentiellement avec t (phase inactive), alors que cette densité tend vers une constante non nulle (phase active) pour $x > x_c$. Près du point de transition, on a $\rho \sim (x - x_c)^\beta$, où β est un exposant critique qui joue un rôle analogue à l'exposant correspondant des transitions de phases du second ordre à l'équilibre. De plus, on peut définir les exposants de corrélation spatiale et temporelle, ainsi que δ , défini par le comportement de $\rho(t)$ à $x = x_c$, $\rho(t) \sim t^{-\delta}$. La classe d'universalité de la percolation dirigée apparaît dans de nombreux problèmes physiques décrivant une transition dynamique entre une phase active et une phase inactive.

Une version continue de la PD (strictement équivalente à la PD de liens) a été résolue dans le cadre d'un nouveau type d'approximation. En dimension d'espace $d = 1$ (plus le temps t), cette approximation conduit à $\beta = (1 - 1/\sqrt{5})/2 = 0.276393202\dots$, en très bon accord avec la meilleure estimation numérique $\beta = 0.276486(8)$. De plus $x_c = 0.644\dots$ est correctement donné à quelques % près ($x_c = 0.618\dots$), et d'autres propriétés fines sont remarquablement bien reproduites [43]. Cette approximation a été récemment étendue à la transition PCPD (pair contact process with diffusion) qui est une nouvelle classe d'universalité décrivant des systèmes où le processus de création nécessite la présence d'une paire de particules [44].

2.2.13 Effets électrostatiques dans les films de savon

Chercheur: D.S. Dean

Avec R. Horgan, D.S. Dean a examiné la théorie de champs d'un film de savon à trois dimensions dans le cadre particulier d'une approximation à faible couplage. Ils ont trouvé un régime attractif dans ce modèle qui peut expliquer l'effondrement observé dans les films non-ioniques, soit dans ce régime de faible couplage [79]. L'attraction est ici similaire à l'effet Casimir, généré par les fluctuations du vide, qui donne une force attractive entre deux surfaces conductrices à courte distance. On prévoit de confronter notre théorie avec les expériences en cours sur les films de savons au Laboratoire de Physique Statistique de l'ENS Paris. La régularisation de charge dans les films de savon a aussi été étudiée [83]. On a pu calculer les effets des fluctuations autour du champ moyen sur la charge de surface. Il a été démontré que ces effets des fluctuations changent le comportement de la pression de disjonction, même pour les films épais (cet effet n'est pas présent si les effets de régularisation de charge ne sont pas pris en compte). Le formalisme mathématique développé afin d'étudier les films de savons est basé sur l'observation que la théorie de champs du type Sine-Gordon qui décrit le système peut être vue comme un champ à deux dimensions qui se propage dans une coordonnée temporelle qui correspond à la direction perpendiculaire au film. Le système est décrit par une équation de Schrödinger fonctionnelle et les propriétés thermodynamiques

peuvent et liées à la matrice de diffusion pour le propagateur fonctionnel du système. Ce formalisme a permis de retrouver une preuve alternative du « contact value theorem » [84] qui relie la pression du film à la charge de la surface et à la densité ionique sur la surface dans le cas d'une charge surfacique constante et uniforme. Ce formalisme a également permis de fournir une généralisation du « contact value theorem » au cas où il y a une discontinuité diélectrique entre le film et l'extérieur du film.

2.2.14 Milieux Granulaires

Chercheur: D.S. Dean

D.S. Dean et A. Lefèvre ont introduit une dynamique simple pour ces modèles de spins, connu sous le nom « tapping », qui modélise les systèmes granulaires mécaniquement perturbés. Cette dynamique inclut une étape de relaxation où le système suit une dynamique de type Métropolis ou Glauber, jusqu'à ce qu'il se trouve bloqué dans un état métastable. Ensuite, le système est secoué en retournant en parallèle chaque spin avec une probabilité de « tapping » p , ce qui modélise les systèmes granulaires mécaniquement perturbés. Les simulations numériques ont montré un comportement semblable aux systèmes granulaires expérimentaux. Les résultats les plus marquants concernent les transitions de phase dans ces systèmes où on a démontré que la mesure d'Edwards peut expliquer les transitions de phase et leurs ordres [78]. Dans les milieux granulaires, cette transition correspond à une séparation de phase pour un système de deux types de grains, ou à une transition entre un empilage aléatoire et un ordre cristallin. Dans un travail récent [82], des expériences ont été proposées qui permettront de vérifier une forme faible de l'hypothèse d'Edwards pour ces systèmes, en regardant les fluctuations de volume dans ces systèmes à différents taux de forçage. La mesure d'Edwards est très difficile à calculer pour les systèmes physiques, cependant la puissance de l'approche proposée est que la version faible de la mesure d'Edwards proposée peut être testée sans une connaissance précise de la densité d'états métastables du système.

2.2.15 Les verres de spins en champ moyen généralisé

Chercheur: D.S. Dean

La théorie champ moyen d'un verre de spin avec des interactions entre voisins et plus proches voisins a été étudiée [75]. Le modèle possède le même hamiltonien que le modèle de Sherrington-Kirkpatrick (SK) $H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} K_{ij} S_i S_j$ mais la matrice d'interaction K prend la forme $K = \pm J J^T$ où J est une matrice dans l'ensemble Gaussien et J est donc la matrice d'interaction pour le modèle SK. Dans ce modèle la symétrie statistique $K \rightarrow -K$ est brisée. On a trouvé qu'en prenant la signe $+$, il y a une transition de phase continue comme dans le modèle SK avec une brisure continue de la symétrie des répliques au point de transition. Cependant, en choisissant le signe $-$ on trouve une brisure discontinue de la symétrie des répliques, avec la phénoménologie d'un verre structural. C'est-à-dire qu'il y a une première transition dynamique et ensuite une transition statique. On a suggéré que ce changement de comportement est dû à la nature de la densité de valeurs propres de la matrice d'interaction. Dans le cas du signe $+$, la densité de valeurs propres, qui correspond à la région de basse énergie, s'annule à la valeur propre maximale. Dans le cas du signe $-$, la densité de valeurs propres diverge dans cette région. Nos calculs analytiques ont été confirmés par des simulations numériques. Avec ses étudiants de thèse, R. Cherrier et A. Lefèvre, D.S. Dean a étudié les modèles champ moyen avec matrices d'interaction J statistiquement invariantes sous les transformations de rotation [81]. Ils ont pu classer les transitions vitreuses dans ces modèles en fonction de la densité des valeurs propres de la matrice J . Ces résultats très généraux sont en accord avec les idées proposées en [82]. Pendant ce travail, ils ont aussi introduit une façon de réaliser la moyenne sur le désordre avec la méthode des répliques, ce qui a permis de retrouver très simplement certains résultats classiques de la théorie des matrices aléatoires. Avec cette technique, ils ont pu aussi calculer le nombre moyen des états métastables dans certains de ces modèles.

2.3 Cohérence quantique & information quantique

Les thèmes principaux de recherche de cette équipe sont structurés autour de l'application des méthodes issues du chaos quantique vers les problèmes de la physique mésoscopique, la localisation d'Anderson, l'interaction à plusieurs corps. Récemment, ces méthodes ont été appliquées à l'étude du calcul quantique.

Cette équipe est construite autour de quatre permanents: **R. Fleckinger, K. Frahm, B. Georgeot & D. L. Shepelyansky.**

Au total, pendant les années 2002-2003, 25 articles scientifiques ont été produits. Les thématiques de recherche ci-dessous sont soutenues financièrement par:

- le gouvernement américain (NSA and ARDA under ARO contract No. DAAD19-01-1-0553 on « quantum computing », durée 3 ans).

- la communauté européenne (RTN contract HPRN-CT-2000-0156 « Quantum transport on an atomic scale », durée 4 ans et contrat IST-FET IST-2001-38869 EDIQIP « Effects of décohérence and imperfections for quantum information processing », durée 3 ans)

- le ministère de la recherche (ACI Nanosciences-nanotechnologies LOGIQUANT, durée 2 ans).

2.3.1 Localisation d'Anderson en présence d'interaction.

Dans le domaine du chaos quantique, il a été établi que la structure chaotique des fonctions d'onde augmente spectaculairement l'interaction effective entre particules. Cet effet a été confirmé dans le cadre de la physique nucléaire pour l'interaction faible et la brisure de parité, ainsi que dans les atomes complexes. L'étude de ce type d'effets du désordre dans le domaine de la physique du solide est très récente.

En effet, bien qu'il soit bien connu depuis les travaux de P. W. Anderson (1958) que la présence de désordre peut localiser les fonctions d'onde d'un système sans interaction grâce aux interférences quantiques, l'effet conjugué du désordre et des interactions électroniques était inconnu jusqu'à il y a peu.

En 1994, D. L. Shepelyansky a étudié l'effet décrit ci-dessus d'augmentation chaotique d'une interaction pour des fonctions d'onde complexes, dans le cadre d'un problème à deux particules. Il a été montré que la présence d'une interaction peut changer qualitativement les propriétés de transport d'un tel système désordonné. Dans la phase où tous les états à une particule sont localisés, des paires de particules peuvent se propager sur des distances bien supérieures à leur taille ou même se délocaliser, que l'interaction soit répulsive ou attractive

Ce résultat a attiré l'attention d'autres groupes et ce thème de recherche initié à Toulouse est maintenant développé également par des équipes en Israël, à Saclay, à Heidelberg et à Novossibirsk . Les travaux subséquents effectués à Toulouse ont montré que le phénomène était contrôlé par un paramètre noté κ qui mesure le nombre de niveaux sans interaction qui sont mélangés par celle-ci. En général $\kappa \sim \Gamma_2 \rho_2$ où Γ_2 est le taux de transition induit par l'interaction et ρ_2 est la densité d'états à deux particules. A une dimension, la longueur de localisation pour une paire l_c est augmentée par rapport à celle pour une particule l_1 par un facteur $l_c/l_1 \sim \kappa > 1$. En dimension deux, l'augmentation est exponentielle $\ln(l_c/l_1) \sim \kappa > 1$ et en dimension trois les paires sont délocalisées pour $\kappa > 1$, même si les états à une particule sont tous localisés. Ces prédictions ont été confirmées par des simulations numériques sur différents modèles et par les résultats des autres groupes.

L'étude de deux particules en interaction était un premier pas, qui a permis de comprendre les effets qualitatifs de l'interaction à deux corps dans un système désordonné. L'étude de ces effets dans des systèmes à N corps ($N > 2$) a été entreprise récemment. L'étude de la phase localisée est la plus difficile. En effet, il faut travailler à densité électronique finie et étudier les propriétés de transport. Ce sujet est cependant d'une très grande actualité. Des expériences récentes réalisées par Kravchenko et al. ont montré l'existence d'une transition métal-isolant pour des électrons en dimension deux, dans un potentiel aléatoire et soumis à de fortes interactions. Ce résultat expérimental a été confirmé par plusieurs équipes dans le monde (Cambridge, Tallahassee, Princeton, Rehovot) et a beaucoup frappé la communauté scientifique. En effet il est connu qu'en dimension deux, les électrons sans interaction sont toujours localisés en présence de désordre. L'opinion générale était qu'une interaction répulsive n'aurait dû que renforcer la localisation. Le phénomène observé par Kravchenko et al. ne possède pas d'explication théorique à ce jour. Les idées développées ci-dessus pourraient expliquer un tel phénomène; la délocalisation de paires de particules entraînerait la délocalisation de tout le système.

Des travaux dans cette direction se sont poursuivis pendant la période 2002-2003. L'utilisation de méthodes numériques a permis également d'obtenir des résultats nouveaux sur la transition isolant-supraconducteur dans les systèmes désordonnés, en particulier mettant en évidence une phase de bi-particules localisées qui n'apparaît pas dans l'approche champ moyen.

Un travail a concerné l'étude du modèle de Hubbard désordonné en dimension trois avec interaction attractive entre fermions. Ce modèle a été étudié numériquement par des méthodes de Monte-Carlo projectives. Cette approche implémentée sur les machines de l'IDRIS (NEC SX5) a permis d'atteindre des tailles record avec 108 fermions de spin 1/2. Le code numérique a été optimisé pour cet ordinateur, permettant d'atteindre une vitesse de 2 Gigaflops. Cette étude numérique a démontré pour la première fois l'apparition de paires localisées en dimension trois induite par l'interaction attractive dans le régime qui serait métallique sans interaction. Ceci a permis de proposer un scénario pour expliquer les

résultats expérimentaux surprenants obtenus par l'équipe de Gantmakher à Chernogolovka (dépendance non-monotone de la résistivité d'un film supraconducteur en fonction du champ magnétique appliqué). Ces travaux sont exposés dans [95].

Le travail le plus récent est l'étude numérique des propriétés de l'état fondamental du modèle de Hubbard répulsif pour des électrons de spin-1/2 sur un réseau bidimensionnel avec des énergies sur site désordonnées. La méthode de Monte-Carlo projective a été utilisée pour obtenir des valeurs très précises des distributions de charge pour l'état fondamental du système avec N_p et $N_p + 1$ particules. La différence entre ces deux distributions a permis d'étudier les propriétés de localisation d'une particule supplémentaire ajoutée. Les résultats obtenus à remplissage 1/4 sur des systèmes de taille finie montrent qu'une interaction répulsive du type Hubbard a un effet de délocalisation très prononcé sur les électrons d'un réseau désordonné bidimensionnel. Néanmoins, les limites de l'approche numérique n'ont pas permis de conclure sur l'existence d'une transition métal-isolant dans la limite thermodynamique en dimension deux. Ces travaux ont été exposés dans [101].

2.3.2 Effets des imperfections sur le calcul quantique; nouveaux algorithmes

Ces questions sont liées au problème plus général des effets combinés de l'interaction et du désordre dans les systèmes à plusieurs corps. Ces phénomènes ont été étudiés également par notre groupe dans des contextes différents. En particulier, l'étude numérique d'un modèle de plusieurs fermions dans une boîte métallique avait permis de mettre en évidence l'existence d'une température critique à partir de laquelle les fonctions d'onde deviennent *chaotiques*. Ce type d'effet avait aussi été étudié dans les systèmes de spins quantiques désordonnés. Nous avons ensuite appliqué ces méthodes à l'étude de l'ordinateur quantique.

En effet, depuis quelques années, l'idée de construire un ordinateur quantique a attiré un grand intérêt dans la communauté scientifique. Les motivations sont de plusieurs types. La première est liée à la miniaturisation des composants électroniques: il viendra bientôt un moment où les effets de cohérence quantique ne pourront plus être négligés. La question se posait donc de construire une théorie de l'information et une algorithmique en tenant compte de ces effets. Ceci a été résolu ces dernières années, et on sait maintenant décrire le modèle théorique d'un ordinateur quantique, essentiellement un ensemble de « qubits » (c'est-à-dire systèmes à deux états) sur lesquels on agit par des transformations unitaires. Des travaux ont alors permis d'établir que la parallélisation massive due au nombre exponentiel d'états multi-qubits dans l'espace de Hilbert pouvait permettre d'accélérer de manière spectaculaire la vitesse de résolution de certains problèmes, d'abord dans la simulation de la mécanique quantique, mais aussi en d'autres cas comme la décomposition en facteurs premiers d'un grand nombre (ceci ayant des applications fondamentales en cryptographie). La question s'est donc posée de construire un ordinateur quantique, un problème technologiquement très ardu. Pour l'instant, seulement des systèmes de quelques qubits ont été construits, sur lesquels les opérations essentielles de calcul quantique ont pu être effectuées.

Un tel système en présence d'interactions et d'imperfections est susceptible de devenir chaotique. Nous avons montré qu'une limitation fondamentale existait dans ces systèmes; en effet l'apparition du chaos quantique qui se manifeste par l'ergodicité des fonctions d'onde et l'apparition de fluctuations spectrales proches de celles de matrices aléatoires, rend impossible le fonctionnement de l'ordinateur, car les fonctions d'onde des qubits individuels sont mélangées par l'interaction et ne sont plus bien définies. Une interaction entre les qubits est nécessaire, car il faut être capable de les faire évoluer de manière cohérente. Nous avons montré, par des arguments analytiques et numériques, qu'une interaction suffisamment forte allait nécessairement créer une transition vers le chaos et détruire l'ordinateur quantique. Néanmoins, nous avons pu montrer que cette transition a lieu à une valeur de l'interaction qui décroît linéairement avec le nombre de qubits, même si la distance entre niveaux voisins décroît, elle, exponentiellement. Ce résultat détermine un domaine de paramètres raisonnable où l'ordinateur quantique peut fonctionner. Ce travail avait été remarqué par un article de presse dans la version internet de la revue Nature. Ces résultats s'appliquaient au « hardware » de l'ordinateur quantique, c'est-à-dire sans qu'aucun algorithme quantique ne soit effectué. De manière complémentaire, des travaux plus récents ont permis d'aborder l'étude des états propres d'un ordinateur quantique sur lequel un algorithme quantique simule un modèle simple de mécanique quantique. Les résultats ont montré que dans le régime où le système quantique simulé est non intégrable, la transition vers le chaos de l'ordinateur quantique a lieu pour des valeurs de l'interaction beaucoup plus faibles. En revanche l'échelle de temps où le chaos quantique se développe reste similaire [90,96].

Un autre travail [103] a permis de comparer ce type d'imperfections avec les effets de portes quantiques imparfaites (bruit aléatoire), sur un ordinateur quantique simulant un modèle dynamique simple fondé sur la transformation d'ondelette quantique. Les résultats obtenus ont permis d'explorer un large domaine

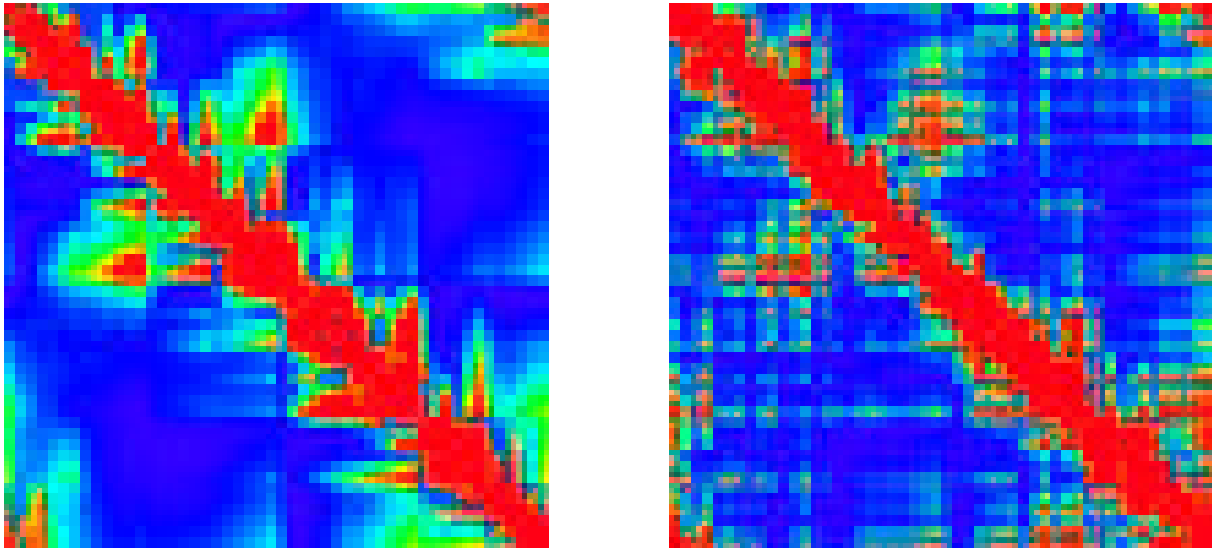


FIG. 2.8 – *Eléments de matrice d'un modèle dynamique fondé sur la transformée d'ondelettes dans la base computationnelle sur un ordinateur quantique de 12 qubits. A gauche: ordinateur parfait, à droite: ordinateur avec erreurs statiques modérées ($\epsilon = 0.0005$).*

de paramètres, à la fois en amplitude des erreurs et en nombre de qubits (voir Figure 2.8). Ceci a permis d'établir que les erreurs statiques sont paramétriquement les plus importantes. Ceci implique que le seuil de tolérance aux fautes, usuellement calculé pour un bruit aléatoire, doit être diminué de plusieurs ordres de grandeur en présence d'erreurs statiques, un résultat important pour la conception d'ordinateurs quantiques fonctionnels.

Nous avons également abordé l'étude de la simulation de systèmes physiques sur un ordinateur quantique. Nous nous sommes d'abord intéressé à un système quantique très utilisé dans le cadre du chaos quantique, le rotateur pulsé. Un algorithme quantique spécifique avait été développé par notre groupe, permettant un gain de temps exponentiel sur ce type de problème. Ce modèle est extrêmement riche, car non seulement il permet d'étudier les phénomènes liés au chaos quantique, mais il modélise également la physique des atomes de Rydberg, permettant des comparaisons avec les résultats expérimentaux. De plus, il présente un phénomène de localisation similaire à la localisation d'Anderson dans les solides, si bien que son étude permet de comprendre également la physique des électrons dans un système désordonné, un domaine de recherche très développé depuis des années en physique des solides. La conception d'un algorithme quantique simulant ce système avec une efficacité exponentielle non seulement présente un intérêt comme nouvel algorithme quantique, mais aussi comme une application possible de l'ordinateur quantique à la simulation de systèmes physiques. Ce travail avait été remarqué par un article de presse dans la version internet de la revue Nature. Un travail récent a permis d'analyser en détail les effets des erreurs sur les résultats de cet algorithme, et de préciser les informations que l'on peut obtenir qui seraient inaccessibles classiquement. Dans cette étude, nous avons considéré l'effet des imperfections (bruit dans les portes quantiques) sur plusieurs quantités physiques caractérisant le système. Pour toutes les quantités considérées, les lois d'échelles sont polynômiales en l'amplitude du bruit ϵ . Par contre, pour certaines quantités (second moment de la fonction d'onde, effet tunnel), l'erreur varie exponentiellement avec le nombre de qubits n_q , ce qui peut créer des problèmes si un ordinateur quantique de grande taille est un jour construit. En revanche, d'autres quantités présentent des lois d'échelles polynômiales à la fois en ϵ et n_q , comme la fidélité et les distributions dans l'espace de phase (fonctions de Wigner et de Husimi). Ces dernières quantités représentent une manière particulièrement simple de comparer dynamiques classique et quantique, et peuvent être directement mesurées sur la fonction d'onde au moyen d'un qubit-sonde (voir Figure 2.9) [99].

Un autre algorithme quantique efficace a été également développé, permettant la simulation de l'application « dent de scie » (sawtooth). Ce système possède une physique intéressante, et l'algorithme permet des simulations non triviales à partir de 6 ou 12 qubits. L'étude des effets des imperfections (bruit dans les portes quantiques, interaction résiduelle entre qubits) a permis de préciser les effets des différentes sources d'erreurs sur la simulation complète de ce système physique complexe. Un travail complémentaire s'est attaché au régime où le système présente une localisation quantique, et a permis de préciser comment extraire la longueur de localisation pour de larges systèmes à partir du calcul quantique, et de

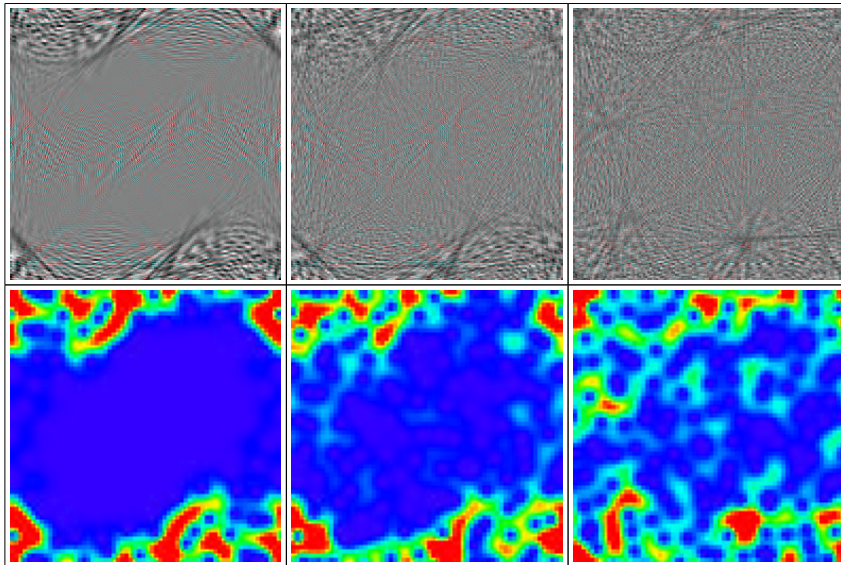


FIG. 2.9 – Fonction de Wigner (haut) et de Husimi (bas) du rotateur pulsé simulé sur un ordinateur quantique de 7 qubits, avec un bruit aléatoire dans les portes quantiques (de gauche à droite $\epsilon = 0, \epsilon = 0.002, \epsilon = 0.004$). Les couleurs varient de bleu ou blanc (minimum) à rouge ou noir (maximum).

démontrer la robustesse de ces résultats en présence d'un bruit modéré [97]. Un autre résultat récent montre qu'un troisième type de système quantique, correspondant à un potentiel de double puits, peut être également simulé efficacement par un ordinateur quantique. Ce système présente le phénomène d'effet tunnel assisté par le chaos, un effet observé expérimentalement que l'algorithme proposé permet de simuler efficacement [91]. Enfin, le rotateur pulsé présente un phénomène de localisation dynamique, mais pas de transition métal-isolant. Un autre algorithme quantique a été proposé permettant de simuler la transition d'Anderson entre états localisés et états étendus. L'algorithme permet un gain quadratique près du point critique par rapport à un algorithme classique, et peut être implémenté avec 7-10 qubits. L'effet des erreurs statiques sur cet algorithme a été étudié numériquement, montrant qu'elles ont pour conséquence un décalage du point critique. Les résultats numériques et analytiques ont permis d'établir la loi d'échelle de ce décalage en fonction des différents paramètres [106].

Les algorithmes évoqués ci-dessus permettent de simuler efficacement des systèmes quantiques sur un ordinateur quantique. Il peut paraître naturel de pouvoir simuler la mécanique quantique efficacement sur un ordinateur quantique, bien qu'en fait une telle tâche ne soit pas évidente à concrétiser sous forme d'un algorithme pratique. Il est plus surprenant d'imaginer qu'un ordinateur quantique puisse simuler efficacement la mécanique classique. Pourtant, les problèmes présentant du chaos classique sont très difficiles à simuler sur un ordinateur classique. En effet, l'instabilité exponentielle conduit à une croissance exponentielle au cours du temps de la moindre imprécision sur la distribution classique initiale. Il est donc important de pouvoir simuler de tels systèmes avec une précision très grande. Nous avons montré sur un exemple précis, l'application du chat d'Arnold, que l'ordinateur quantique pouvait simuler un nombre exponentiel de points en un temps polynomial, permettant d'atteindre une précision hors d'atteinte sur un ordinateur classique [88]. De plus, si les erreurs classiques d'imprécision sur la position des points (dus à la précision limitée de l'ordinateur classique) croissent exponentiellement au cours du temps, nous avons montré que les erreurs quantiques, dues aux imperfections de l'ordinateur quantique, croissent seulement polynômialement avec le temps. Ceci signifie que non seulement l'ordinateur quantique résout le problème de l'imprécision des ordinateurs classiques, mais encore il est beaucoup plus stable vis-à-vis de ses propres erreurs que l'ordinateur classique. Ceci permet en particulier à l'ordinateur quantique d'inverser la flèche du temps pour des systèmes macroscopiques, ce qui permet de donner un nouvel éclairage au vieux problème de l'irréversibilité en mécanique statistique [87]. Enfin, le travail le plus récent dans cette direction a permis de montrer que l'ordinateur quantique, bien que fonctionnant de manière réversible, pouvait également simuler efficacement des systèmes classiques irréversibles. Ce type de système, qui mène en général à la présence d'un attracteur étrange dans l'espace des phases, est extrêmement commun dans la nature, en physique, biologie, chimie, météorologie, etc... Il a été montré qu'un algorithme quantique permettait de simuler ces systèmes, et de fournir des informations sur des

fonctions de corrélation dans l'espace de Fourier qui sont inaccessibles par le calcul classique. De plus, il a été explicitement montré que cet algorithme est exponentiellement plus rapide qu'un algorithme Monte-Carlo classique, et qu'il est stable en présence d'un bruit modéré [94]. Pour tous ces différents algorithmes, les effets des erreurs classiques et quantiques, et des différentes sources de décohérence, ont été étudiés numériquement sur des superordinateurs, permettant d'atteindre des tailles de système jusqu'à 26 qubits. Le travail le plus récent concerne l'étude des retours de Poincaré et des orbites périodiques de systèmes dynamiques. En utilisant des « subroutines » usuelles dans la construction des algorithmes quantiques, il est possible d'accélérer la recherche de telles quantités sur un ordinateur quantique par rapport à un ordinateur classique. Suivant le type de système dynamique considéré, le gain peut être exponentiel (chat d'Arnold) ou seulement quadratique (rotateur pulsé). Ces quantités ont beaucoup été utilisées dans l'étude de la mécanique classique, en particulier chaotique, et permettent de reconstruire de nombreuses caractéristiques du système [108].

Une étude a permis d'explorer numériquement les effets de la mesure quantique sur la localisation dynamique dans le modèle du rotateur pulsé. Des travaux précédents avaient conclu que de telles mesures menaient à un étalement diffusif de la probabilité. Au contraire, dans ce travail il a été démontré que la localisation peut être préservée en présence de mesures répétées d'un qubit. Une transition entre une phase localisée et une phase délocalisée a été détectée, qui dépend des paramètres du système et du choix du qubit mesuré [111].

Un autre travail a permis d'étudier numériquement comment un signal sonore enregistré dans la fonction d'onde d'un ordinateur quantique pouvait être reconnu et restauré avec un nombre minimal de mesures en présence d'erreurs aléatoires dans les portes quantiques. Une méthode a été développée à cette fin qui utilise des éléments du standard MP3 de compression de données sonores, et qui a pu être testée pour un nombre modéré de qubits, montrant qu'elle permet de reconstruire la voix humaine ou le son d'une fonction d'onde complexe [109].

Cette thématique de recherche a reçu le soutien financier du programme « quantum computing » du gouvernement américain, du programme IST-FET de la Communauté Européenne et de l'ACI « nanosciences-nanotechnologies » du ministère de la Recherche.

2.3.3 Ondes dans un fluide en rotation

Une collaboration entre B. Georgeot, M. Rieutord de l'observatoire Midi-Pyrénées à Toulouse et L. Valdetaro de l'Institut Polytechnique de Milan (Italie) s'est développée autour de l'étude des ondes inertielles dans les couches sphériques en rotation. Ce type de système est très répandu dans la nature, depuis les étoiles jusqu'au noyau terrestre et aux réservoirs des satellites. Après linéarisation, l'équation des ondes inertielles dans le fluide est de type hyperbolique (équation de Poincaré) et présente donc des courbes caractéristiques (dans un plan méridien) le long desquelles il y a propagation. À viscosité faible, les calculs numériques ont montré l'existence de solutions concentrées autour d'orbites périodiques formées de branches de caractéristiques. Le système dynamique correspondant à la propagation des caractéristiques est non hamiltonien et possède des bassins d'attraction. Nous avons étudié analytiquement et numériquement ces bassins d'attraction, ce qui permet de préciser comment les trajectoires voisines convergent vers l'orbite périodique attractive. De plus, nous avons repris les équations du fluide et avons réussi à déduire une partie du comportement des solutions stationnaires sur ces orbites périodiques à partir d'analyses asymptotiques. Ceci nous a permis de « suivre » de manière analytique l'évolution de ces ondes quand la viscosité diminue; notre construction est en très bon accord avec les résultats numériques mais permet également de prévoir ce qui se passe pour des viscosités beaucoup plus faibles que celles accessibles par ordinateur, et qui sont souvent celles observées dans la nature. Le travail le plus récent a consisté à développer une théorie asymptotique pour la couche limite autour d'un attracteur dans le cadre d'une approximation particulière. Cette couche, de manière surprenante, obéit aux mêmes équations après quelques changements de variables appropriés qu'une particule quantique dans un puits de potentiel parabolique, c'est à dire le fameux oscillateur harmonique. Ceci fournit en particulier une condition de quantification des modes stationnaires des ondes inertielles, analogue à celle de la mécanique quantique, et en très bon accord avec les résultats numériques en deux dimensions. De manière remarquable, cette théorie simplifiée est une bonne approximation pour une couche sphérique tridimensionnelle au voisinage de l'équateur, où les termes négligés varient peu. Ces résultats ont été exposés dans [93]. De nombreuses applications sont envisageables, astrophysiques (étoiles, atmosphères planétaires), géophysiques (noyau terrestre), océanographiques, etc.

2.3.4 Autres travaux.

Les statistiques de retour de Poincaré ont été étudiées dans les systèmes classiques chaotiques dont la structure de l'espace de phase est hiérarchique (présence d'îlots intégrables et de zones chaotiques). Les résultats obtenus confirment que la probabilité de retour en fonction du temps t obéit asymptotiquement à une loi de décroissance universelle en $1/t^3$ [92].

Les états excités d'une chaîne d'atomes décrite par le modèle de Frenkel-Kontorova classique ont été étudiés [89]. Il a été montré que le nombre de ces états proches de l'état fondamental augmente exponentiellement avec la longueur de la chaîne. Leur structure fractale a été élucidée et décrite sur la base des excitations élémentaires. L'étude du modèle quantique [98] a montré qu'une transition de phase quantique se produisait à une certaine valeur de la constante de Planck effective, séparant deux phases (« pinned instanton glass » et « sliding phonon gas ») dont les excitations élémentaires sont qualitativement différentes.

2.3.5 Thèses, postdocs, habilitations.

Gaëtan Caldara, a soutenu sa thèse dirigée par K. Frahm à l'université de Toulouse III en 2002.

Les résultats obtenus dans [90,97,98] forment une base de la thèse de Simone Montangero, soutenue à l'Université de Come en 2002 (accord de coopération entre les Universités de Come, Zurich, Toulouse et Vilnius).

Nicolas Lafflorencie a commencé une thèse en septembre 2000 sous la direction de K. Frahm et D. Poilblanc.

Benjamin Lévi a commencé une thèse en septembre 2001 sous la direction de B. Georgeot et D. Shepelyansky.

Andrei Poméranisky a commencé une thèse en septembre 2001 sous la direction de D. Shepelyansky et B. Georgeot.

Marcello Terraneo a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe d'octobre 2001 à octobre 2003.

Stefano Bettelli a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe d'avril 2002 à novembre 2003.

Jae-Won Lee a commencé un séjour postdoctoral dans le groupe en janvier 2003.

2.3.6 Prospective

L'équipe envisage de poursuivre dans la direction générale des principaux thèmes de recherche décrits ci-dessus, centrés sur l'effet de l'interaction dans les systèmes désordonnés, l'apparition du chaos quantique dans les systèmes à plusieurs corps, et l'information quantique et le calcul quantique.

L'étude de la localisation d'Anderson en présence d'interaction doit se poursuivre, et permettre d'avoir une image précise des effets couplés du spin, des interactions et du désordre pour des systèmes à plusieurs particules, en particulier en liaison avec les expériences récentes sur la transition métal-isolant en dimension deux.

Le travail sur l'ordinateur quantique doit être poursuivi par l'inclusion d'autres sources d'erreurs comme la décohérence liée à l'interaction avec le monde extérieur, parallèlement à l'étude plus approfondie des effets des imperfections statiques et de l'interaction à plusieurs corps. Les effets de telles erreurs doivent être testés sur des algorithmes simples et efficaces. En effet, des expériences sont menées en ce moment sur différents types d'ordinateurs quantiques (pour l'instant de petite taille) et l'étude de modèles particuliers proches de ces expériences devrait mener à des prédictions précises sur l'opérabilité du calcul quantique dans chaque implémentation expérimentale. Le groupe de D. Cory au MIT (Cambridge, USA) vient de réaliser expérimentalement la simulation quantique de l'application du boulanger quantique (un système présentant du chaos quantique). Ces expériences peuvent être réalisées avec jusqu'à 7 qubits et permettront de tester la simulation quantique d'une dynamique complexe, où les effets des imperfections décrits ci-dessus jouent un rôle primordial. Une autre équipe expérimentale à Innsbruck (groupe de R. Blatt) sera bientôt en mesure d'opérer des portes quantiques sur quelques qubits construits avec des ions froids; les données préliminaires obtenues par cette équipe montrent le rôle très important des imperfections statiques discutées ci-dessus. Il s'agit d'un sujet qui attire beaucoup d'attention dans le monde, et où la vérification numérique des prédictions analytiques est cruciale.

2.4 Dynamique non linéaire des systèmes de fermions finis

Équipe (permanents): M. Belkacem, P. M. Dinh & E. Surau

2.4.1 Présentation des thématiques scientifiques

Durant ces 2 dernières années l'équipe « Agrégats » a poursuivi le développement du programme de recherche portant sur la réponse électronique et ionique des édifices atomiques, et en particulier des agrégats métalliques. Mais le renforcement récent de l'équipe, avec l'arrivée en 2000 de M. Belkacem et de P. M. Dinh en 2002-2003 a permis de développer notre activité dans des voies nouvelles, peu explorées pour nous jusqu'ici. Pour éviter des redites inutiles, nous avons donc choisi de focaliser notre présentation sur ces nouveaux développements en insistant sur la complémentarité des voies de recherche explorées, et en en donnant les extensions et les perspectives envisagées. Le choix d'une présentation courte est donc délibéré.

L'activité de l'équipe « Agrégats » est aujourd'hui structurée autour de trois directions complémentaires et en fortes interactions :

- Dynamique des agrégats libres aux excitations modérées (réponse semi-linéaire) à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendant du temps (TDDFT), dans sa version quantique ou semi-classique (Resp. E. Surau);
- Modèles d'agrégats en champs laser intense fondés sur des approches phénoménologiques de type équations de taux et plus récemment dynamique moléculaire (Resp. M. Belkacem);
- Réponse des agrégats en matrice à des excitations laser ou par impact ionique, à l'aide de modèles fondés sur la TDDFT et traitant la matrice à l'aide d'hamiltoniens effectifs inspirés de la chimie quantique (Resp. P. M. Dinh).

Bien entendu ces trois composantes interagissent fortement entre elles dans un souci d'efficacité de l'équipe, et pour l'intérêt scientifique que porte chaque membre de l'équipe à des travaux connexes. Dans la suite du texte, nous discutons brièvement de l'état d'avancement de ces trois projets, en insistant sur les points saillants des deux dernières années.

2.4.2 Réponse semi linéaire dans les agrégats libres

Le régime semi-linéaire concerne des situations dans lequel l'agrégat est fortement perturbé (émission électronique significative, dépôt d'énergie important) mais conserve néanmoins sa structure sur des temps longs (plusieurs centaines de femtosecondes). Les expériences concernent par exemple la génération d'harmoniques à partir d'agrégats irradiés par laser, les spectres de photoélectrons ou la dynamique pompe sonde. Nous avons particulièrement investi dans ces deux dernières directions. Au niveau des spectres de photoélectrons, nous avons étudié à la fois des aspects formels à très basse énergie (rôle d'états liés non occupés) et leur comportement sous irradiation forte (calculs semi-classiques), par exemple en termes de distributions angulaires. La dynamique pompe sonde a été explorée quant à elle dans plusieurs exemples: excitations collectives de type monopolaire, excitation quadrupolaire par faisceaux lasers croisés, fission. A court terme, nous comptons poursuivre ces deux directions de recherche, en particulier au niveau des distributions angulaires de photoélectrons.

2.4.3 Agrégats en champ laser intense

Nous avons étudié la dynamique d'agrégats atomiques (gaz rares et métalliques) irradiés par des lasers femtosecondes très intenses. Parmi les nombreux modèles proposés pour l'étude de cette interaction, le modèle nanoplasma est bien adapté à sa description. Nous avons plus particulièrement étudié l'influence des collisions électron-surface qui avaient été négligées dans les versions antérieures du modèle. Nous avons montré que ces dernières dominent la dynamique autour de la région de résonance plasmon. La dynamique de l'agrégat en est modifiée de manière très significative, de même que les prédictions du modèle. D'autres développements tels que l'inclusion d'effets non linéaires sur l'absorption d'énergie électromagnétique et l'amortissement par collisions électron-électron sont envisagées.

Par ailleurs, en complément des informations apportées par la modèle nanoplasma, il est nécessaire de développer des modèles microscopiques basés sur la dynamique moléculaire. Cette description nous permettrait de vérifier certaines hypothèses utilisées dans le modèle nanoplasma comme l'homogénéité du système, la thermalisation instantanée, etc. Une description microscopique nous donnerait aussi une meilleure détermination des divers coefficients de transport utilisés dans le modèle nanoplasma, ainsi qu'un accès direct aux spectres en énergies des électrons et des ions pour une éventuelle confrontation à l'expérience.

2.4.4 Agrégats en matrice

L'objectif de cet axe de recherche est, à terme, l'étude des mécanismes de formation des défauts lors d'irradiation laser ou lors d'impact par ions lourds. Dans une première étape et en vue de préparer le passage du cas des agrégats à celui des systèmes étendus, nous avons commencé à étudier la réponse électronique et ionique d'un agrégat métallique piégé à l'intérieur d'une matrice de gaz rare traitée comme un système Van der Waals avec polarisation explicite. Ce « détour » vers la physique des agrégats en matrice offre cependant de très nombreux débouchés vers les multiples résultats expérimentaux récemment obtenus dans ces systèmes. Et nous allons, à court terme, considérer ces questions en détail. Par ailleurs, disposer d'un modèle de matrice polarisable va nous permettre de reprendre nos études sur les agrégats déposés en considérant cette fois-ci une surface polarisable, ce qui élargit considérablement le champ des applications possibles pour la réponse d'agrégats métalliques déposés sur de telles surfaces.

Parallèlement à ces travaux, l'exploration de méthodes théoriques adaptées à la dynamique des systèmes de fermions finis (agrégats, noyaux, ...) a été poursuivie. Le deuxième volet de cette activité s'est développé dans deux directions complémentaires : équations cinétiques semi-classiques pour les agrégats, extensions dissipatives ou stochastiques des méthodes de champ moyen quantique dépendant du temps.

Enfin, durant ces deux dernières années la collaboration avec le professeur. P.-G. Reinhard de l'Université d'Erlangen a continué à se renforcer. Plusieurs thèses ont été soutenues dans le cadre de notre activité et, à plusieurs reprises, des échanges d'étudiants pour des séjours de plusieurs mois ont eu lieu.

2.4.5 Autres réalisations

Collaborations

Notre activité de recherche s'effectue en étroite collaboration avec le groupe du Prof. P. G. Reinhard (Univ. Erlangen, Allemagne) avec lequel nous avons disposé d'un programme d'échange PROCOPE en 1999, 2000 et 2001. Cette collaboration est ancienne et s'est avérée très fructueuse depuis son démarrage au début des années 1990.

Le prof. P. G. Reinhard a été membre étranger à l'Institut Universitaire de France en 1998/99.

Encadrement de thèses

Les programmes de recherche présentés ci-dessus ont servi et servent de support à plusieurs thèses :

- « Dynamique Moléculaire dans les agrégats métalliques violemment excités : approche semi classique », E. Giglio; Thèse soutenue en 2002, Université de Toulouse,
- « The double differential photoionisation cross-section of metal clusters », A. Pohl; Thèse soutenue en 2003, Université d'Erlangen,
- « Density-functional description of metal clusters », K. Andræ; Thèse soutenue en 2003, Université d'Erlangen,
- « Extension du champ moyen dépendant du temps pour la dynamique d'agrégats en champ laser intense », M. Ma; Thèse prévue début 2004, Université de Toulouse,
- « Interactions laser intenses-agrégats », F. Mégi; Soutenance prévue fin 2004.

Ecriture d'ouvrages scientifiques

P. G. Reinhard et S. Surraud ont achevé l'écriture d'un livre intitulé « Introduction to cluster dynamics », livre d'introduction à la physique et la dynamique des agrégats, publié par Wiley-VCH en 2003.

Chapitre 3

Bilan quantitatif 2002-2003

3.1 Publications dans des revues à comité de lecture (RCL)

Fermions fortement corrélés

1. F. Alet and E. Sørensen, *Self-adapting method for the localization of quantum critical points using Quantum Monte Carlo techniques*, Phys. Rev. B **65**, 092408 (2002).
2. F. Alet and E. Sørensen, *Cluster Monte Carlo algorithm for the quantum rotor model*, Phys. Rev. E **67**, 015701(R) (2003).
3. M. Troyer, S. Wessel and F. Alet, *Flat histogram methods for quantum systems: algorithms to overcome tunneling problems and calculate the free energy of a quantum system*, Phys. Rev. Lett. **90**, 120201 (2003).
4. Kenji Tsutsui, Didier Poilblanc and Sylvain Capponi, *Low-frequency current fluctuations in doped ladders*, Phys. Rev. B **65**, 020406(R) (2002),
5. H. D. Chen, J. P. Hu, S. Capponi, E. Arrigoni and S. C. Zhang, *Antiferromagnetism and hole pair checkerboard in the vortex state of high T_c superconductors*, Phys. Rev. Lett. **89**, 137004 (2002).
6. Andreas Laeuchli, Didier Poilblanc, T.M. Rice, *Li Induced Spin and Charge Excitations in a Spin Ladder*, Phys. Rev. Lett. **88**, 257201 (2002).
7. D.J. Garcia, K. Hallberg, C.D. Batista, S. Capponi, D. Poilblanc, M. Avignon and B. Alascio, *Charge and spin inhomogeneous phases in the ferromagnetic Kondo lattice model*, Phys. Rev. B **65**, 134444, (2002).
8. D. Poilblanc and D.J. Scalapino, *Calculation of $\Delta(k,\omega)$ for a 2D t - J model*, Phys. Rev. B **66**, 052513 (2002).
9. S. Capponi, D. Poilblanc, *Charge density correlations in t - J ladders investigated by the contractor-renormalisation method*, Phys. Rev. B **66**, 180503 (2002).
10. Federico Becca, Frédéric Mila and Didier Poilblanc, *Tetramerisation of a frustrated spin-1/2 chain*, Phys. Rev. Lett. **91**, 067202 (2003).
11. Thierry Giamarchi, Edmond Orignac et Didier Poilblanc, *Les échelles quantiques*, Pour la Science, No 305, p.58, Mars 2003.
12. Nicolas Laflorencie and Didier Poilblanc, *Doped coupled frustrated spin-1/2 chains with four-spin exchange*, Phys. Rev. Lett. **90**, 157202 (2003).
13. C. Lavalley, M. Arikawa, S. Capponi, F.F. Assaad and A. Muramatsu, *Antiholons in one-dimensional t - J models*, Phys. Rev. Lett. **90**, 216401 (2003).
14. Edmond Orignac and Didier Poilblanc, *Superconducting fluctuations in the Luther-Emery liquid*, Phys. Rev. B **68**, 052504 (2003).
15. Didier Poilblanc, D. J. Scalapino and Sylvain Capponi, *Superconducting gap in a two-leg t - J ladder*, Phys. Rev. Lett. **91**, 137203 (2003).
16. H. Aliaga, D. Magnoux, A. Moreo, D. Poilblanc, S. Yunoki, E. Dagotto, *Theoretical Study of Half-Doped Models for Manganites: Fragility of the CE Phase with Disorder, Two Types of Colossal Magnetoresistances, and Charge-Ordered States for Electron-Doped Materials*, Phys. Rev. B **68**, 104405 (2003).

17. Nicolas Laflorencie and Heiko Rieger, *Comment on « Disorder induced quantum phase transition in random-exchange spin-1/2 chains »*, Phys. Rev. Lett. **91**, 229701 (2003).
18. Nicolas Laflorencie, Didier Poilblanc and Anders Sandvik, *Magnetic ordering in a doped spin-Peierls system*, condmat/0308334, soumis à Phys. Rev. Lett.
19. G. Misguich, C. Lhuillier, M. Mambrini and P. Sindzingre, *Degeneracy of the ground-state of anti-ferromagnetic spin-1/2 Hamiltonians*, Eur. Phys. J B **26**, 167 (2002).
20. J.-B. Fouet, M. Mambrini, P. Sindzingre and C. Lhuillier, *Planar pyrochlore: A valence bond crystal*, Phys. Rev. B **67**, 054411 (2003).
21. Karlo Penc, Matthieu Mambrini, Patrik Fazekas and Frédéric Mila, *Quantum Phase Transition in the SU(4) Spin-Orbital Model on the Triangular Lattice*, Phys. Rev. B **68**, 012408 (2003).
22. S. Dommange, M. Mambrini, B. Normand and F. Mila, *Static impurities in the kagome lattice: dimer freezing and mutual repulsion*, cond-mat/0306299, Phys. Rev. B (sous presse).
23. A. Läuchli, C. Honerkamp and T.M. Rice, *d-Mott phases in one and two dimensions*, cond-mat/0309567, Phys. Rev. Lett. (sous presse).
24. Andreas Läuchli and Didier Poilblanc, *Spin-charge separation in two-dimensional frustrated quantum magnets*, condmat/0310597, soumis à Phys. Rev. Lett.
25. A. Läuchli G. Schmid and S. Trebst, *Spin nematics in the bilinear-biquadratic S=1 spin chain*, condmat/0311082, soumis à Phys. Rev. Lett.

Physique Statistique

26. Chavanis P.H. 2002 *Gravitational instability of finite isothermal spheres*, A&A **381**, 340
27. Chavanis P.H. 2002 *Gravitational instability of finite isothermal spheres in general relativity. Analogy with neutron stars*, A&A **381**, 709
28. Chavanis P.H. 2002 *Gravitational instability of polytropic spheres and generalized thermodynamics* A&A **386**, 732
29. Chavanis P.H. & Sommeria J. 2002 *Statistical mechanics of the shallow water system*, Phys. Rev. E **65**, 026302
30. Chavanis P.H. 2002 *Effective velocity created by a point vortex in two-dimensional hydrodynamics* Phys. Rev. E **65**, 056302
31. Chavanis P.H. 2002 *Phase transitions in self-gravitating systems. Self-gravitating fermions and hard spheres models*, Phys. Rev. E **65**, 056123
32. Chavanis P.H., Rosier C. & Sire C. 2002 *Thermodynamics of self-gravitating systems*, Phys. Rev. E **66**, 036105
33. Chavanis P.H. 2002 *Gravitational instability of slowly rotating isothermal spheres*, A&A **396**, 315
34. Sire C. & Chavanis P.H. 2002 *Thermodynamics and collapse of self-gravitating Brownian particles in D dimensions*, Phys. Rev. E **66**, 046133
35. Chavanis P.H. & Ispolatov S. 2002 *Phase diagram of self-attracting systems*, Phys. Rev. E **66**, 036109
36. Chavanis P.H. 2003 *Gravitational instability of isothermal and polytropic spheres*, A&A **401**, 15
37. Chavanis P.H. 2003 *Generalized thermodynamics and Fokker-Planck equations. Applications to stellar dynamics and two-dimensional turbulence*, Phys. Rev. E **68**, 036108
38. Chavanis P.H. & Rieutord M. 2003 *Statistical mechanics and phase diagrams of rotating self-gravitating fermions*, A&A, sous presse
39. Chavanis P.H. & Sire C. 2003 *Anomalous diffusion and collapse of self-gravitating Langevin particles in D dimensions*, Phys. Rev. E, sous presse
40. Chavanis P.H. 2003 *Generalized thermodynamics and kinetic equations: Boltzmann, Landau, Kraemers and Smoluchowski*, Physica A, sous presse
41. Chavanis P.H. 2003 *Dynamics and thermodynamics of 2D vortices. Application to jovian vortices and Jupiter's great red spot*, soumis à Physica A
42. Sire C. & Chavanis P.H. 2003 *Post-collapse dynamics of self-gravitating Brownian particles in D dimensions*, soumis à Phys. Rev. E
43. Sire C., *A precise approximation for directed percolation in $d = 1 + 1$* , Phys. Rev. E **66**, 066128 (2002).

44. Sire C., *Analytical results for the pair contact process with diffusion*, soumis à Phys. Rev. E (2003).
45. N. Destainville, R. Mosseri, F. Bailly, *A formula for the number of tilings of an octagon by rhombi*, Theor. Comp. Sc., sous presse (2003).
46. M. Widom, R. Mosseri, N. Destainville, F. Bailly, *Arctic octahedron in three-dimensional rhombus tilings and related integer solid partitions*, J. Stat. Phys. **109**, 945 (2002).
47. N. Destainville, M. Widom, R. Mosseri, F. Bailly, *Random tilings of high symmetry: I. Mean-field theory*, soumis à J. Stat. Phys. (2003), cond-mat/0310514.
48. M. Widom, N. Destainville, R. Mosseri, F. Bailly, *Random tilings of high symmetry: II. Monte Carlo simulation*, soumis à J. Stat. Phys. (2003), cond-mat/0310515.
49. N. Destainville, *Flip dynamics in octagonal rhombus tiling sets*, Phys. Rev. Lett. **88**, 30601 (2002).
50. N. Destainville, *Bounding spectral gaps of Markov chains: a novel exact multi-decomposition technique*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 3647 (2003).
51. V. Desoutter, N. Destainville, *Slow dynamics due to entropic barriers in the one-dimensional « descent model »*, soumis à Eur. Phys. J. B (2003), cond-mat/0302185.
52. F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez, D.S. Dean, L. Salomé, *Confined diffusion without fences of a G protein coupled receptor as revealed by single particle tracking*, Biophys. J. **84**, 356 (2003).
53. J. Vidal, N. Destainville, R. Mosseri, *Quantum dynamics in high codimension tilings: from quasi-periodicity to disorder*, Phys. Rev. B **68**, 172202 (2003).
54. S.N. Majumdar and P.L. Krapivsky, *Extreme Value Statistics and Traveling Fronts: An Application to Computer Science*, Phys. Rev. E. **65**, 036127 (2002).
55. S.N. Majumdar, *Statistics of Multiple Sign Changes in a Discrete Non-Markovian Sequence*, Phys. Rev. E. Rapid Communications, **65**, 035104 (R) (2002).
56. D.S. Dean and S.N. Majumdar, *The Exact Distribution of the Oscillation Period in the Underdamped One Dimensional Sinai Model*, J. Phys. A, **34**, L697 (2001).
57. D.S. Dean and S.N. Majumdar, *Phase Transition in a Random Fragmentation Problem with Applications to Computer Science*, J. Phys. A Math: Gen. **35**, L501 (2002).
58. S.N. Majumdar and D.S. Dean, *Exact Solution of a Drop-push Model for Percolation*, Phys. Rev. Lett., **89**, 115701 (2002).
59. S.N. Majumdar and A. Comtet, *Local and the Occupation Time of a Particle Diffusing in a Random Medium*, Phys. Rev. Lett., **89**, 060601 (2002).
60. S.N. Majumdar and A.J. Bray, *Large-deviation Functions for Nonlinear Functionals of a Gaussian Stationary Markov Process*, Phys. Rev. E **65**, 051112 (2002).
61. G.C.M.A. Ehrhardt, A.J. Bray, and S.N. Majumdar, *Persistence of a Continuous Stochastic Process with Discrete-time Sampling: Non-Markov Processes*, Phys. Rev. E, **65**, 041102 (2002).
62. S.N. Majumdar and D.S. Dean, *Exact Occupation Time Distribution in a Non-Markovian Sequence and Its Relation to Spin Glass Models*, Phys. Rev. E **66**, 041102 (2002).
63. S.N. Majumdar and A. Comtet, *Exact Asymptotic Results for Persistence in the Sinai Model with Arbitrary Drift*, Phys. Rev. E **66**, 061105 (2002).
64. A. Comtet, J. Desbois and S.N. Majumdar, *The Local Time Distribution of a Particle Diffusing on a Graph*, J. Phys. A Math:Gen **35**, L687 (2002).
65. S.N. Majumdar and D.S. Dean, *Slow Relaxation in a Constrained Ising Spin Chain: a Toy Model for Granular Compaction*, Phys. Rev. E **66**, 056114 (2002).
66. S.N. Majumdar and P.L. Krapivsky, *Extreme Value Statistics and Traveling Fronts: Various Applications*, Physica-A, **318**, 161 (2003).
67. A.J. Bray, S.N. Majumdar, and R.A. Blythe, *Formal Solution of a Class of Reaction-Diffusion Models: Reduction to a Single-Particle Problem*, Phys. Rev. E Rapid Communications, **67**, 060102(R) (2003).
68. S.N. Majumdar and A.J. Bray, *Persistence of Manifolds in Nonequilibrium Critical Dynamics*, Phys. Rev. Lett., **91**, 030602 (2003).
69. S.N. Majumdar, *Traveling Front Solutions to Directed Diffusion Limited Aggregation, Digital Search Trees and the Lempel-Ziv Data Compression Algorithm*, Phys. Rev. E, **68**, 026103 (2003).
70. S.N. Majumdar and A.J. Bray, *Survival Probability of a Ballistic Tracer Particle in the Presence of Diffusing Traps*, to appear in Phys. Rev. E Rapid Communications (2003), cond-mat/0305386.

71. G.M.C.A. Ehrhardt, S.N. Majumdar, and A.J. Bray, *Persistence Exponents and the Statistics of Crossings and Occupation Times for Gaussian Stationary Processes*, à paraître dans Phys. Rev. E (2003), cond-mat/0306101.
72. C. Dasgupta, M. Constatin, S. Das Sarma, and S.N. Majumdar, *Persistence Time Scales in Equilibrium Step Fluctuations*, soumis à Phys. Rev. Lett. (2003), cond-mat/0307086.
73. S.N. Majumdar and S. Nechaev, *An Anisotropic Ballistic Deposition Model with Links to the Ulam Problem and the Tracy-Widom Distribution*, à paraître dans Phys. Rev. E (2003), cond-mat/0307189.
74. S.N. Majumdar, *Persistence of a Particle in the Matheron-de Marsily Velocity Field*, à paraître dans Phys. Rev. E Rapid Communications (2003).
75. D.S. Dean, *Approximation scheme for the density of states of the Laplacian on random graphs*, *J. Phys. A.* **35**, L153 (2002).
76. F. Mila and D.S. Dean, *Dynamic spin-glass behavior in a disorder-free, two-component model of quantum frustrated magnets*, *Eur. Phys. J. B.* **26**, 301, (2002).
77. D.S. Dean and F. Ritort, *The squared interaction matrix Sherrington-Kirkpatrick Model*, *Phys. Rev. B.* **65**, 224209 (2002).
78. A. Lefèvre and D.S. Dean, *Phase transitions in the steady state behavior of mechanically perturbed spin glasses and ferromagnets*, *Phys. Rev. B* **65**, 220403, (2002).
79. D.S. Dean and R.R. Horgan, *Electrostatic fluctuations in soap Films*, *Phys. Rev. E* **65**, 061603, (2002).
80. R. Cherrier, D.S. Dean and A. Lefèvre, *The statics of generalized Random Orthogonal Model spin glasses*, *Phys. Rev. E* **67**, 046112 (2003).
81. R. Cherrier, D.S. Dean and L. Lefèvre, *The number of metastable states in generalized random orthogonal model*, *J. Phys. A* **36**, 3935 (2003).
82. D.S. Dean and A. Lefèvre, *A possible test of the thermodynamic approach to granular media*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 198301 (2003).
83. D.S. Dean and R.R. Horgan, *Weak non-linear surface charging effects in electrolytic films*, *Phys. Rev. E.* **68** 046112 (2003).
84. D.S. Dean and R.R. Horgan, *The field theoretic derivation of the contact value theorem and its modification by the Casimir effect*. sous presse *Phys. Rev. E* (2003).
85. D.S. Dean and R.R. Horgan *Field theoretic calculation of the surface tension for a model electrolyte system* cond-mat/0311163, soumis à *Phys. Rev. E* (2003).
86. D.S. Dean I.T. Drummond and R.R. Horgan *Effective diffusion constant in a two dimensional medium of charged point scatterers* cond-mat/0311125, soumis à *J. Phys. A* (2003).

Cohérence quantique & Information quantique

87. B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computer inverting time arrow for macroscopic systems*, *Eur. Phys. J. D* **19** (2002) p.263-266 (quant-ph/0105149).
88. B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Efficient quantum computation of high harmonics of the Liouville density distribution*(quant-ph/0110142) or Georgeot and Shepelyansky reply, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) p.219802.
89. O.V.Zhironov, G.Casati and D.L.Shepelyansky, *Fractal Spin Glass Properties of Low Energy Configurations in the Frenkel-Kontorova chain*, *Phys. Rev. E* **65** (2002) 026220 (cond-mat/0107131).
90. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, *Eigenstates of operating quantum computer: hypersensitivity to static imperfections*, *Eur. Phys. J. D* **20** (2002) p. 293-296 (quant-ph/0112132).
91. A.D.Chepelianskii and D.L.Shepelyansky, *Schrodinger cat animated on a quantum computer* (quant-ph/0202113) or *Simulation of chaos-assisted tunneling in a semiclassical regime on existing quantum computers* *Phys. Rev. A* **66** (2002) p.054301.
92. B. Chirikov and D.L.Shepelyansky, *To the problem of Poincaré recurrences in generic Hamiltonian systems* (cond-mat/0207705) or Chirikov and Shepelyansky reply *Phys. Rev. Lett.* v.89 (2002) p.239402.
93. M. Rieutord, L. Valdetaro and B. Georgeot, *Analysis of singular inertial modes in a spherical shell: the slender toroidal shell model*, *J. of Fluid Mech.* **463** (2002), p. 345-360.
94. M.Terraneo, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Strange attractor simulated on a quantum computer*, *Eur. Phys. J. D* **22** (2003) p.127-130 (quant-ph/0203062).

95. B.Srinivasan, G.Benenti and D.L.Shepelyansky, *Transition to an Insulating Phase Induced by Attractive Interactions in the Disordered Three-Dimensional Hubbard Model*, Phys. Rev. B **66** (2002) p.172506 (cond-mat/0203508).
96. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, *Statistical Properties of Eigenvalues for an Operating Quantum Computer with Static Imperfections*, Eur. Phys. J. D **22** (2003) pp.285-293 (quant-ph/0206130).
97. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, *Dynamical localization simulated on a few qubits quantum computer*, Phys. Rev. A **67** (2003) p.052312 (quant-ph/0210052).
98. O.V.Zhiron, G.Casati and D.L.Shepelyansky, *Quantum phase transition in the Frenkel-Kontorova chain: from pinned instanton glass to sliding phonon gas*, Phys. Rev. E **67** (2003) p.056209 (cond-mat/0210379).
99. B.Lévi, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computing of quantum chaos in the kicked rotator model*, Phys. Rev. E **67** (2003) p.046220 (quant-ph/0210154).
100. S.Bettelli and D.L.Shepelyansky, *Entanglement versus relaxation and decoherence in a quantum algorithm for quantum chaos*, Phys. Rev. A **67** (2003) p.054303 (quant-ph/0301086).
101. B.Srinivasan, G.Benenti and D.L.Shepelyansky, *Delocalizing effect of the Hubbard repulsion for electrons on a two-dimensional disordered lattice*, Phys. Rev. B **67** (2003) p.205112 (cond-mat/0301623).
102. S.Bettelli, L. Serafini, T. Calarco, *Toward an architecture for quantum programming*, Eur. Phys. J. D, **25**, No. 2, pp. 181-200 (2003) (cs.PL/0103009).
103. M.Terraneo and D.L.Shepelyansky, *Imperfection effects for multiple applications of the quantum wavelet transform*, Phys. Rev. Lett. **90** (2003) p.257902 (quant-ph/0303043).
104. A.A.Pomeransky, *Strong superadditivity of the entanglement of formation follows from its additivity*, Phys. Rev. A **68** (2003) p.032317 (quant-ph/0305056).
105. R.Livi, S.Ruffo and D.L.Shepelyansky, *Le cheminement de Kolmogorov de l'intégrabilité au chaos et au-delà*, to appear in « L'héritage de Kolmogorov en physique », Eds. R.Livi et A.Vulpiani Belin, Paris (2003) et Lect. Notes Phys., Springer (2003).
106. A.A.Pomeransky and D.L.Shepelyansky, *Quantum computation of the Anderson transition in presence of imperfections*, submitted to Phys. Rev. Lett. 30 June 2003 (quant-ph/0306203).
107. B.Georgeot et D.L.Shepelyansky, *Les ordinateurs quantiques affrontent le chaos*, to appear in Images de la Physique 2003 (quant-ph/0307103).
108. B.Georgeot, *Quantum computing of Poincare recurrences and periodic orbits*, submitted (quant-ph/0307233).
109. J.W.Lee, A.D.Chepelianskii and D.L.Shepelyansky, *Treatment of sound on quantum computers*, submitted to Phys. Rev. Lett. 31 July 2003 (quant-ph/0309018).
110. S.Bettelli, *A quantitative model for the effective decoherence of a quantum computer with imperfect unitary operations*, soumis (quant-ph/0310152).
111. M.Terraneo and D.L.Shepelyansky, *Dynamical localization, measurements and quantum computing*, submitted to Phys. Rev. Lett. Sept 2003 (quant-ph/0309192).

Agrégats

112. P. G. Reinhard and E. Suraud, *Metal clusters dynamics*, à paraître dans « Encyclopedia of Nanosciences », Am. Scien. Publish; édité par H. S. Nalwa, 2003.
113. M. Belkacem, A. Bouchene, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Photodynamics of clusters*, à paraître dans « Encyclopedia of Nanosciences », Am. Scien. Publish; édité par H. S. Nalwa, 2003.
114. K. Andrae, M. Belkacem, P. M. Dinh, E. Giglio, M. Ma, A. Pohl, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Metal cluster dynamics*, à paraître dans Lecture Notes in Physics, Springer; édité par K. Morawetz, 2003.
115. K. Andrae, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Theoretical exploration of pump and probe in medium sized metal clusters*, J. Phys. B **35**(2002)4203-4210.
116. E.Giglio, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Semiclassical description of ionic and electronic dynamics in metal clusters*, Ann. Phys. (Leipzig) **11**(2002)291.
117. C. Legrand, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Comparison of self interaction corrections for metal clusters*, J. Phys. B **35**(2002)1115-1128.
118. L. Serra, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Density functional calculations for shell closures in Mg clusters*, Euro. Phys. Rev. D **18**(2002)327-333.

119. T. Berkus, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Dynamical effects in the optical response of carbon chains*, Int. J. Mol. Sc. **3**(2002)69-75.
120. P. G. Reinhard, V. O. Nesterenko, E. Suraud, S. El Gammal and W. Kleinig, *Scissors modes in triaxial metal clusters*, Phys. Rev. A **66**(2002)013206.
121. P. Huovinen, M. Belkacem, P. J. Ellis and J. I. Kapusta, *Dileptons and photons from coarse grained microscopic dynamics and hydrodynamics compared to experimental data*, Phys. Rev. C **66**(2002)014903 [arXiv: nucl-th/0203023].
122. C. Alt *et al.* [NA49 Collaboration] (P. M. Dinh), *Directed and elliptic flow of charged pions and protons in Pb + Pb collisions at 40-A-GeV and 158-A-GeV*, Phys. Rev. C **68**(2003)034903 [arXiv:nucl-th/0303001].
123. E. Giglio, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Angular distribution of emitted electrons in sodium clusters: a semiclassical approach*, Phys. Rev. A **67**(2003)043202.
124. F. Megi, M. Belkacem, M. A. Bouchene, E. Suraud and G. Zwicknagel, *On the importance of damping phenomena in clusters irradiated by intense laser fields*, J. Phys. B **36**(2003)273-282.
125. E. Giglio, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Influence of hte dynamical correlations on the ionization of highly irradiated metal clusters*, Nucl. Inst. Methods B **205**(2003)350.
126. P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Metal clusters in strong fields*, Nucl. Inst. Methods B **209**(2003)41.
127. A. Ipatov, P. G. Reinhard and E. Suraud, *A microscopic study of sodium cluster deposition on an insulating surface*, Int. J. Mol. Sc. **4**(2003)301-311.
128. A. Pohl, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Photoelectron spectra from K and Na clusters*, Phys. Rev. A **68**(2003)053202.
129. K. Andrea, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Systematics of spin-polarized small Na clusters*, Soumis à Euro. Phys. Journ. **D**, 2002.
130. A. Ipatov, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Velocity dependence of metal cluster deposition on an insulating surface*, Soumis à J. Phys. Chem. **B**, 2002.
131. K. Andrea, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Cross beams pump and probe dynamics in metal clusters*, Soumis à Phys. Rev. Lett., 2003.

3.2 Actes de colloques

Fermions fortement corrélés

132. N. Laflorencie and D. Poilblanc, *Simulations of pure and doped low-dimensional spin-1/2 gapped systems*, Proceedings of the International Workshop on « *Quantum Magnetism: Microscopic Techniques for Novel States of Matter* », 288 WE-Heraeus-Seminar, Nov. 4-6 2002, Bad Honnef Physikzentrum, Germany (Springer 2003).
133. D. Poilblanc, *Numerical investigations of t-J ladders*, Proceedings of The 7th International Conference on Materials and Mechanism of Superconductivity (M2S-HTC-VII), May 25-30 2003, Rio (Bresil), Physica C, « *Superconductivity and its applications* » (Elsevier, North-Holland, 2003).
134. E. Orignac and D. Poilblanc, *Superconducting fluctuations in a Luther-Emery liquid*, Proceedings of The Fifth International Symposium on Cristalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets, (ISCOM 2003), Journal de Physique IV, sous presse.
135. Nicolas Laflorencie and Didier Poilblanc, *Magnetic ordering in doped coupled frustrated spin-1/2 chains with four-spin exchange*, Proceedings of the 7th International Symposium of research in High Magnetic Fields, July 20-23 2003, Toulouse (France), Physica B.
136. Nicolas Laflorencie, Didier Poilblanc and Anders Sandvik, *Antiferromagnetism in coupled spin-Peierls chains induced by non magnetic dopants*, Proceedings of the International Conference on « *Highly Frustrated Magnetism* » HFM-2003, Grenoble (August 2003), J. Phys. C: Solid State Phys.

Physique Statistique

137. Chavanis P.H. 2002 *Statistical mechanics of violent relaxation in stellar systems*, Proceedings of the Conference on Multiscale Problems in Science and Technology (Springer)

138. Chavanis P.H. 2002 *The Self-Gravitating Fermi gas* Proceedings of the Conference Dark2002: 4th International Heidelberg Conference on Dark Matter in Astro and Particle Physics, 4-9 Feb 2002, Cape Town, South African Astroparticles (Springer)
139. Chavanis P.H. 2002 *Statistical mechanics of two-dimensional vortices and stellar systems* in « Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long Range Interactions », edited by T. Dauxois, S. Ruffo, E. Arimondo, M. Wilkens, Lecture Notes in Physics Vol. 602, Springer
140. N. Destainville, M. Widom, R. Mosseri, F. Bailly, *The arctic phenomenon in three-dimensional codimension-one tilings*, « Proceedings of the ICQ8 Conference, Bangalore, India », J. Non-Cryst. Solids, à paraître (2003).
141. F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez, D. Dean, L. Salomé, *Interprotein interactions are responsible for the confined diffusion of a G-protein-coupled receptor at the cell surface*, Biochem. Soc. Trans. **31**, 1001 (2003).
142. L. Salomé, F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez and D.S. Dean, *Receptor diffusion restricted to domains without compartmentalization as determined by single particle tracking* Biophys J. **82**, 194 (2002).
143. D.S. Dean and A. Lefèvre, *The steady state of the tapped Ising model*, dans *Challenges in Granular Physics*, ed T. Halsey et A. Mehta, World Scientific (2003).
144. D.S. Dean and A. Lefèvre *A possible experimental test of the thermodynamic approach to granular media* sous presse Proceedings of Unifying Concepts in Glasses and Granular Media (Capri 2003) (Elsevier)

Agrégats

145. F. S. Zhang, F. Wang, E. Suraud and F. Spiegelmann, *Temperature dependence of the vibrational properties of sodium microclusters*, Nucl. Phys. A **684**(2002)655c-657c.
146. K. Andrea, A. Pohl, P. G. Reinhard, C. Legrand, M. Ma and Suraud, *Time dependent density functional theory from a practitioners perspective*, International workshop on Nonlinear dynamics in nuclei and related systems, Dresden, Germany, August 2002, Springer, sous presse.
147. C. Legrand, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Self interaction corrections in metal clusters*, Nova Science, Condensed Matter Theories, 18, sous presse, XXVI Intern. Workshop on Condensed Matter Theories Luso, Portugal, September 2002.
148. N. Borghini, P. M. Dinh and J. Y. Ollitrault, *Analysis of directed flow from three-particle correlations*, 16^{ème} Conférence Internationale sur les Collisions d'Ions Lourds Ultrarelativistes (Quark Matter 2002), Nantes, 18-24 juillet 2002 [arXiv: nucl-th/0208014].
149. A. Wetzler, N. Borghini, P. M. Dinh, J. Y. Ollitrault, A. M. Poskanzer et S. A. Voloshin, [NA49 Collaboration], *Directed and elliptic flow in Pb + Pb collisions at 40-AGeV and 158-AGeV*, 16^{ème} Conférence Internationale sur les Collisions d'Ions Lourds Ultrarelativistes (Quark Matter 2002), Nantes, 18-24 juillet 2002 [arXiv:nucl-ex/0212023].

3.3 Conférences invitées

Fermions fortement corrélés

1. D. Poilblanc, 19th General Conference of the European Physical Society Condensed Matter Division, Brighton, 7-11 avril 2002.
2. D. Poilblanc, GDR « Oxydes à propriétés remarquables », Ecole d'Aussois, juin 2002 (cours de synthèse).
3. D. Poilblanc, International Workshop on « Quantum Magnetism: Microscopic Techniques for Novel States of Matter », WE-Heraeus Seminar, 4-6 nov. 2002, Bad Honnef Physikzentrum, Allemagne.
4. D. Poilblanc, 2nd Open Symposium on « Field-Induced New Quantum Phenomena in Magnetic Systems », December 4-6 2002, Kobe (Japan).
5. D. Poilblanc, The 7th International Conference on Materials and Mechanism of Superconductivity (M2S-HTC-VII), May 25-30 2003, Rio, Brésil.
6. D. Poilblanc, International Conference on Theoretical Trends in Low Dimensional Magnetism (LDM2003), July 23-25 2003, Firenze, Italie.

7. D. Poilblanc, International Conference on Highly Frustrated Magnetism (HFM-2003), August 26-30 2003, Grenoble, France.
8. D. Poilblanc, 2003 Swiss Workshop on Materials with Novel Electronic Properties, September 29-October 1st 2003, Les Diablerets, Suisse.
9. S. Capponi, International Conference CMT27 (Condensed Matter Theory), September 15-20 2003, Toulouse, France.

Physique statistique

10. PHC: Conference *Dark matter in astro and particle physics*, Cape Town, South Africa (R.D. Viollier), oral communication (4-9/2/02).
11. PHC: Conference *Dynamics and Thermodynamics of Systems with long range Interactions*, Les Houches School (T. Dauxois), lecture (18-22/2/02).
12. PHC: Conference *Nonlocal elliptic and parabolic problems*, Bedlewo (P. Biler), lecture (9-14/9/03).
13. PHC: Conference *Next 2003: News and Expectations in Thermostatistics*, Bedlewo (G. Kaniadakis), lecture (21-28/9/03).
14. ND: « Quatrièmes Journées sur les systèmes dynamiques discrets », Lyon, 2002.
15. ND: European Summer University « Imaging techniques in animal and human research », Toulouse, 2003.
16. SM: « IACM-II meeting », Indian Institute of Science and J. Neheru Center for Advanced Studies, Bangalore, India, 2002.
17. SM: « Statphys-Kolkata IV », IACS (Indian Association for the Cultivation of Science) and S.N. Bose Center for Natural Sciences, Calcutta, India, 2002.
18. SM: « Journées Sur les Graphes en Physique », IHP, Paris, June, 2002.
19. SM: « 50 Years of Theoretical Physics », Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutta, India, January, 2003.
20. SM: « Geometry and Statistics of Random Growth », IHP, Paris, Jan-April, 2003.
21. SM: « Arbres Aléatoires et Algorithmes », Versailles, March, 2003.
22. SM: « Workshop on Non-Equilibrium Systems », Center for Nonlinear Studies (CNLS), Los Alamos National Laboratory, USA, June, 2003.
23. SM: « Non-Equilibrium Statistical Physics in Low Dimensions and Reaction Diffusion Systems », Max Planck Institute at Dresden, Germany, September 2003.
24. CS: Workshop on Plastic Deformations (Mars 2002, Trieste, Italie).
25. CS: Workshop on Non-linear Dynamics (Septembre 2003, Dresden, Allemagne).
26. CS: Workshop on Nonlinear Elliptic and Parabolic Problems (Septembre 2003, Bedlewo, Pologne).
27. DD: *Some applications of statistical physics for searching and sorting in computer science*, Aspects of Complexity and its Applications, Rome, Italie, 2002.
28. DD: *Some applications of statistical physics for searching and sorting in computer science*, Glassy States of Matter, KITP Santa Barbara, U.S.A, 2003.
29. DD: *A possible experimental test of the thermodynamic approach to granular media*, Unifying Concepts in Granular Media and Glasses, Capri, Italie 2003.

Cohérence quantique & information quantique

30. B. Georgeot, 23-27 mars 2002: conférence internationale « Semiclassical and Quantum Multibody Systems », Mathematics Research Center, Université de Warwick (Royaume-Uni).
31. D. Shepelyansky, 7 juin 2002 EC IST-FET QIPC meeting (European IST-FET program on « Quantum information processing and communications »), Brussels, Belgium.
32. S. Bettelli, B. Georgeot, D. Shepelyansky, M. Terraneo 20-22 juin 2002: QTRANS EU Mid-term review « Quantum transport on an atomic scale », Palerme, (Italie).
33. B. Georgeot, 24-28 juin 2002: conférence internationale « International workshop on chaotic transport and complexity in classical and quantum dynamics », Carry-le-Rouet (France).
34. D. Shepelyansky, 19 - 24 aout 2002, conférence internationale « Quantum computing program review » organized by ARO/NSA/ARDA, Nashville, TN, USA.

35. D. Shepelyansky, 22 - 27 août 2002, conférence internationale « Feynman Festival », Univ. of Maryland, College Park, MD, USA.
36. B. Georgeot, 15-18 septembre 2002: conférence internationale « European QIPC workshop » organisée par la Communauté Européenne, Dublin (Irlande).
37. D. Shepelyansky, 28 Octobre - 8 Novembre 2002 International Joint ICTP-INFM School/Workshop « Entanglement at the nanoscale », 28 October - 8 November, 2002, ICTP, Trieste, Italy.
38. B. Georgeot, 28-29 janvier 2003: conférence internationale « Inhomogeneous random systems », Université de Cergy Pontoise, France.
39. D. Shepelyansky, 10 - 21 février 2003, International Euroworkshop « Quantum computers: nanoscopic implementation », ISI, Villa Gualino, Torino, Italy
40. D. Shepelyansky, 25 Avril 2003, exposé invité à la Journée de Physique pour l'Institut de Mathématiques, Calcul et contrôle quantiques, Paris.
41. D. Shepelyansky, 24 - 25 Mai 2003, International Workshop on Quantum Chaos and Localisation, Warsaw, Poland.
42. D. Shepelyansky, 9 - 10 Juin 2003. ARO/NSA/ARDA meeting « Theory in Quantum Computing », Harper's Ferry, West Virginia, USA.
43. D. Shepelyansky, 17 - 21 Juin 2003, NATO Advanced Research Workshop « Quantum chaos: theory and applications », Como, Italy.
44. D. Shepelyansky, 18 - 23 Août 2003, Quantum computing program review organized by ARO/NSA/ARDA, Nashville, TN, USA.
45. D. Shepelyansky, 15 - 17 Septembre 2003, International Conference « Kolmogorov's legacy in physics: one century of chaos, turbulence and complexity », ICTP, Trieste, Italy.

Agrégats

46. E. Suraud, Rencontres des Physiciens Nucléaires Théoriciens, Orsay, mars 2002.
47. E. Suraud, International workshop on Similarity in Diversity (SID 8), Univ. at Buffalo, Buffalo, NY, USA, mai 2002.
48. E. Suraud, International workshop on Swift Heavy Ions in Matter (SHIM02), Taormina, Sicile, mai 2002.
49. M. Belkacem, International workshop on Formation of Correlations, Bad Honnef, Allemagne, juin 2002.
50. E. Suraud, XXVI Intern. Workshop on Condens. Matter Theories, Luso, Portugal, septembre 2002.
51. E. Suraud, Rencontres des Physiciens Nucléaires Théoriciens, Lyon, avril 2003.
52. P. M. Dinh, Rencontres des Physiciens Nucléaires Théoriciens, Lyon, avril 2003.
53. E. Suraud, VIII Intern. Workshop on Nonequilibrium Physics at Short Time Scales, Max-Planck Institut für Physik Komplexer Systeme, Dresden, mai 2003.
54. P. M. Dinh, VIII Intern. Workshop on Nonequilibrium Physics at Short Time Scales, Max-Planck Institut für Physik Komplexer Systeme, Dresden, mai 2003.
55. E. Suraud, International workshop on materials, Saclay, France, juin 2003.
56. E. Suraud, International workshop on Density Functional Theory, ECT*, Trento, Italie, juillet 2003.
57. E. Suraud, Intern. conference NANOMAT 2003, Bruxelles, Belgique, Octobre 2003.
58. E. Suraud, International workshop VLASOVIA, Nancy, France, Novembre 2003.

3.4 Activités internationales

3.4.1 Réseaux internationaux & contrats

1. European Commission Research Training Networks contract No. HPRN-CT-2000-0156 « *Quantum transport on an atomic scale* », 6 noeuds européens incluant Toulouse (avec London, Como, Freiburg, Palermo etc).
 - Durée: 4 ans à partir du 1 sept. 2000
 - Équipe impliquée: CQIQ
 - Coordinateur principal pour Toulouse: D.L. Shepelyansky

2. USA National Security Agency (NSA) and Advanced Research and Development Activity (ARDA) under Army Research Office (ARO) contract No. DAAD19-01-1-0553, « *Quantum computing* » (signé avec la DR14 du CNRS).
 - Durée: 3 ans à partir du 1 mai 2001
 - Équipe impliquée: CQIQ
 - Coordinateur principal: D.L. Shepelyansky 2nd coordinateur: B. Georgeot
3. European Commission contrat IST-FET No IST-2001-38869 EDIQIP *Effects of decoherence and imperfections for quantum information processing*, 4 nœuds européens incluant Toulouse (avec Londres, Como, Darmstadt).
 - Durée: 3 ans à partir du 1 janv. 2003
 - Équipe impliquée: CQIQ
 - Coordinateur du réseau: Toulouse (D.L. Shepelyansky)
4. ACI (Action Concertée Incitative) Nanosciences-nanotechnologies LOGIQUANT, 4 nœuds incluant Toulouse (avec ENS Paris, Saclay et LPS Jussieu).
 - Durée: 2 ans à partir du 1 sept. 2002
 - Équipe impliquée: CQIQ
 - Coordinateur du réseau pour Toulouse D.L. Shepelyansky
5. Programme de coopération ECOS-SECYT (France-Argentine)
 - Durée: 4 ans à partir du 30 juin 1997, renouvelé en 2002.
 - Coordinateurs principaux: M. Avignon (LEPES, Grenoble) & B. Alascio (Inst. Balseiro, Bariloche, Argentine)
 - Équipe impliquée: FFC
6. PROCOPE Collaboration Erlangen (Allemagne) - Caen - Toulouse, 2002-2003, en continuation du PROCOPE 1999-2001 (collaboration Erlangen - Toulouse) de E. Suraud.
 - Coordinateurs: M. Belkacem (Toulouse) & G. Zwicknagel (Univ. Erlangen)

3.4.2 Organisations de conférences, workshops et rencontres

1. Organisation par D. Poilblanc du colloque « Strongly correlated fermion systems », JMC9 de la SFP (Nancy, août 2004), (Organisateurs JMC9: D. Malterre & A. Schuhl)
2. Organisation par D. Shepelyansky et R. Fleckinger du workshop international « Quantware », Toulouse 1-14 Juillet 2002
3. Organisation par D. Shepelyansky (avec P. Grangier et M. Santha) du programme « Information quantique » à l'Institut Henri Poincaré (Paris, janvier-avril 2006).
4. Organisation par M. Belkacem, P. M. Dinh, M. Mambriani et E. Suraud de la 27^{ème} édition de la conférence internationale « Condensed Matter Theory » (Toulouse, septembre 2003), [co-organisateurs: J. Groenen et M. B. Lepetit]; édition par M. Belkacem et P. M. Dinh de Condensed Matter Theory 27, Nova Science.
5. Organisation par M. Belkacem de la 4^{ème} édition de la conférence internationale « Theory of Atomic and Molecular Clusters » (Toulouse, 24–28 avril 2004), [Organisateurs: F. Spiegelman et G. M. Pastor].
6. Minicolloque organisé par D. Dean: « Statistical Physics of Complex Systems » (Toulouse, 4 juillet 2003).

3.5 Rayonnement local & national

3.5.1 Programmes Pluriformations (PPF)

Un certain nombre des membres du LPT sont impliqués dans les 2 programmes suivants:

PPF « Fermions Fortement Corrélés » (renouvelé en 2003)

Les systèmes à fermions fortement corrélés (FFC), domaine de la physique de la matière condensée en évolution très rapide, font appel à des concepts fondamentaux réellement novateurs dont certains sont

encore mal cernés. Les potentialités de développement de cet axe de recherche sur le campus toulousain sont nombreuses, qu'elles concernent la physique expérimentale, la physique ou la chimie théorique ou encore la chimie du solide. C'est pourquoi, fin 1998, il est apparu opportun de rassembler dans un groupe d'étude et de réflexion les chercheurs directement impliqués autour de la thématique « Fermions fortement corrélés » (FFC) afin d'établir de véritables interactions et discussions scientifiques (tables rondes, séminaires communs, etc.). La composante FFC du LPT prend une part très active dans ce programme. Les 4 années écoulées (99-2002) ont vu se renforcer les liens existant entre les différentes équipes. Le PPF FFC a également eu un impact au niveau de l'organisation de séminaires de haut niveau donnés à la fois dans le cadre des « créneaux » traditionnels (séminaire théorique, etc.) ou à titre « exceptionnel ».

Au niveau théorique, des calculs sont réalisés d'une part au Laboratoire de Physique Quantique (UMR5626) par N. Guihéry, M.B. Lepetit, J.P. Malrieu et G. Pastor (oxydes de vanadium, systèmes spin-Peierls, oxydes de cuivre supraconducteurs, conducteurs organiques, etc.) et d'autre part dans le Laboratoire de Physique Théorique par S. Capponi, M. Mambrini et D. Poilblanc. Il s'agit i) de déterminer par des méthodes *ab-initio* les paramètres de modèles effectifs et ii) d'étudier ces modèles par des méthodes analytiques ou numériques afin de décrire la physique de ces systèmes. L'activité théorique en matière condensée, implantée depuis une dizaine d'années, est de premier plan au niveau international et constitue un des atouts importants pour mener à bien le projet FFC.

PPF « Contrôle cohérent et Calcul Quantique » (B. Girard)

Ce PPF associe deux équipes expérimentales et l'équipe « cohérence quantique & information quantique » du laboratoire. Il ambitionne d'accroître les contacts et les collaborations entre expérimentateurs et théoriciens travaillant sur divers aspects de l'information quantique sur le campus toulousain.

Les équipes impliquées sont l'équipe de B. Girard « Spectroscopie moléculaire ultrarapide et contrôle cohérent » du Laboratoire CAR (qui travaille sur l'étude fondamentale de l'interaction entre impulsion(s) laser ultracourte(s) et système quantique (atomique ou moléculaire)); l'équipe de T. Amand à l'INSA de Toulouse (étude de boîtes quantiques semi-conductrices); l'équipe CQIQ du laboratoire.

3.5.2 Participations aux GDR

Le LPT a pris et prend une part active à la création, à la vie et à l'organisation des tables rondes, rencontres, etc. de plusieurs GDR comme par exemple,

- GDR 2069 « Oxydes à propriétés remarquables » (C. Berthier & G. Collin) qui s'est terminé en 2003,
- GDR NEEM, « Nouveaux états électroniques des matériaux », (C. Simon, CRISMAT), en création et qui couvrira à la fois les thématiques du GDR 2069 et celles des matériaux moléculaires,

pour la composante FFC,

- GDR « Physique quantique mésoscopique » (G. Montambaux)
- GDR 2285 « Information & communication quantique » (J.-P. Poizat)

pour la composante « Cohérence quantique »,

- GDR « Turbulence » (F. Anselmet),

pour P.-H. Chavanis et C. Sire,

- GDR « Agrégats »,

pour l'ensemble de l'équipe « Agrégats »,

- GDR « DFT »,

pour l'ensemble de l'équipe « Agrégats »,

- GDR « Phénomènes hors-équilibre » (S. Fauve),

pour l'ensemble de l'équipe « Physique Statistique ».

3.5.3 Participations à des instances nationales ou locales et responsabilités diverses

- La plupart des membres du LPT sont membres de la CS29 de l'UPS. (D.P. est aussi membre de la CS28).
- M. Belkacem est membre nommé du CNU (29).

- N. Destainville était membre élu du CS de l'UFR jusqu'en mai 2003 et est actuellement membre élu du CA de l'UPS.
- R. Fleckinger était membre du CA de l'UFR PCA jusqu'en mai 2003.
- K. Frahm est membre élu du Conseil du Département de Physique.
- B. Georgeot est membre élu du CS de l'UFR PCA et membre du bureau du GDR « Information quantique ».
- Clément Sire est membre du Comité d'Evaluation du GPEC (CEA-Saclay) et du Comité de Rédaction des Images de la Physique.
- D. Poilblanc est:
 - directeur de l'UMR5152,
 - ancien membre du « Search Committee » du LNCMP (Toulouse),
 - membre nommé du Comité National du CNRS (section 06) et du Bureau de la Section 06,
 - membre des Comités d'Evaluation des Unités mixtes LCMI, CRTBT et LPMMC de Grenoble et représentant de la section 06 dans le CE du LPS-Orsay,
 - responsable du PPF FFC (Toulouse).
- E. Suraud est:
 - directeur de la FR2568, élu par les laboratoires puis nommé par le CNRS,
 - chargé de mission pour la physique théorique à la MSTP du MENRT,
 - directeur scientifique adjoint de l'IN2P3.

3.5.4 Distinctions

- P. M. Dinh a reçu le prix « Jeune Chercheur » Daniel Guinier 2003 de la SFP et le prix de thèse de l'Ecole polytechnique 2003 pour son travail de thèse.
- E. Suraud a reçu le prix Bessel (fondation Humboldt, Allemagne) en 2002 et a été élu à l'académie européenne des sciences en 2003.

Chapitre 4

Orientation scientifique & politique de recrutement

Malgré la diminution très nette de la part CNRS de nos crédits récurrents le « démarrage » du LPT est plutôt positif. En ce qui concerne le potentiel universitaire, le départ de 3 enseignants-chercheurs très actifs en recherche (A. Barelli, MCF, et E. Sørensen, PR2, en 2001 et J. Bellissard, PRCE, en 2002) a été partiellement compensé par le recrutement en 2003 de Phuong Mai Dinh sur le poste MCF laissé vacant. De plus un poste PR2 sera très vraisemblablement ouvert pour la rentrée 2004. Dans le futur, le LPT demandera la publication du deuxième poste de professeur en section 29 du CNU, probablement dès la campagne 2005, afin de pouvoir retrouver ses effectifs antérieurs. Il convient de noter qu'une certaine pression existe déjà quand à la promotion des jeunes enseignants-chercheurs du laboratoire.

Le LPT sollicite également un soutien très fort de la part du CNRS, à la fois en section 02 et en section 06. Le départ de F. Mila (CR1) en 2000 (s'ajoutant à celui de E. Sørensen) avait fortement affaibli la composante « matière condensée ». Le recrutement de Matthieu Mambriani en oct. 2002 comme CR2 (section 06) a fort heureusement permis de renforcer ce groupe dans une thématique proche de celle précédemment animée par F. Mila et que nous désirions maintenir et développer. Nous espérons pouvoir, notamment grâce au CNRS et la section 06, continuer de développer cette activité centrée sur la modélisation et la simulation numérique et qui constitue déjà un pôle unique en France.

Le dynamisme des recherches menées par l'équipe CQIQ (qui a su drainer de nombreux contrats) justifierait un recrutement très rapide en section 02 ou même en section 06 sur un thème à l'interface avec la matière condensée.

De plus, la Physique statistique dont l'activité est très bien reconnue au niveau international pourrait aussi bénéficier d'un recrutement en section 02, voire en section 05, sur un des thèmes communs à ces 2 sections (milieux granulaires,...). Il faut mentionner que cette dernière activité voit son potentiel temporairement diminuer au sein du LPT en raison des congés sabbatiques de David Dean (1 an à l'Université de Cambridge à partir de oct. 2003) et de Satya Majumdar (1 an au LPTMS-Orsay, à partir de février 2004). Il serait souhaitable de faire en sorte que les retours de David Dean et de Satya Majumdar se passent dans les meilleures conditions (avec le recrutement d'un jeune ou au moins l'attribution d'un post-doc).

Enfin il convient de soutenir l'activité du groupe « Agrégats » par un recrutement universitaire ou CNRS à court terme. En effet, en dépit du recrutement récent de P. M. Dinh, ce groupe a aussi vu son potentiel de recherche affaibli par les responsabilités prises par E. Surraud au niveau national (ministère de la recherche puis CNRS).