

Contractualisation vague A 2007-2010

Volet Scientifique

*Laboratoire de Physique Théorique
UMR 5152
Université Paul Sabatier
118, route de Narbonne
31062 Toulouse Cedex*

Laboratoire de Physique Théorique¹
UMR CNRS/UPS 5152

II. Dossier Scientifique²
2002 – 2005

Directeur: Didier POILBLANC³

1. Création: janvier 2003

2. Mise à jour: septembre 2005

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	5
1.4	Étudiants en thèse	6
1.4.1	Liste	6
1.4.2	Thèses soutenues et en cours depuis janvier 2002	6
1.5	Post-docs & visiteurs longue durée	8
1.6	Moyens	8
2	Rapport scientifique	11
2.1	Magnétisme et fermions fortement corrélés	11
2.1.1	Objectifs et contexte	11
2.1.2	Résultats marquants et perspectives	14
2.2	Physique statistique des systèmes complexes	22
2.2.1	Effets électrostatiques en matière molle	22
2.2.2	Systèmes vitreux et désordonnés	23
2.2.3	Physique statistique des pavages aléatoires	25
2.2.4	Systèmes dynamiques discrets et systèmes complexes hors équilibre	25
2.2.5	Physique statistique et biologie	26
2.2.6	Propulsion par une flagelle élastique en rotation	27
2.2.7	Exposant de corrélation temporelle des systèmes conservés	29
2.2.8	Mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée	31
2.2.9	Distributions non-Boltzmanniennes	33
2.2.10	Particules browniennes auto-gravitantes	35
2.3	Cohérence quantique & information quantique	39
2.3.1	Interaction et désordre dans les systèmes de physique du solide à plusieurs corps	40
2.3.2	Effets des imperfections sur le calcul quantique	41
2.3.3	Nouveaux algorithmes quantiques	45
2.3.4	Information quantique, intrication et mesure	47
2.3.5	Chaos quantique dissipatif	48
2.3.6	Ondes dans un fluide en rotation	50
2.3.7	Autres travaux.	50
2.3.8	Thèses, postdocs, habilitations.	50
2.3.9	Prospective	51
2.4	Dynamique non linéaire des systèmes de fermions finis	52
2.4.1	Axes de recherche et perspectives	52
2.4.2	Autres réalisations	54
3	Bilan quantitatif 2002-2005	57
3.1	Publications dans des revues à comité de lecture (RCL)	57
3.2	Actes de colloques	65
3.3	Conférences invitées	67
3.4	Activités internationales	71
3.4.1	Réseaux internationaux & contrats	71

3.4.2	Organisations de conférences, workshops et rencontres	72
3.5	Rayonnement local & national	72
3.5.1	Programmes Pluriformations (PPF)	72
3.5.2	Participations aux GDR	73
3.5.3	Participations à des instances nationales ou locales et responsabilités diverses . . .	73
3.5.4	Distinctions	74
4	Orientation scientifique & politique de recrutement	75

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'Évaluation 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 (scientifiques). Le Laboratoire de Physique Théorique a intégré la quasi-totalité de ces chercheurs et est composé au 1er octobre 2005 de 18 permanents *effectivement présents* (17 chercheurs et enseignants-chercheurs, cf. Tables 1.1 et 1.2 et 1 ITA). Les départs en 2000-2001 de 4 membres (dont 1 détachement du CNRS et 1 disponibilité du MEN) ont été tout d'abord partiellement compensés par 2 recrutements successifs, Matthieu Mambrini comme CR2-CNRS en oct. 2002 et Phuong Mai Sève-Dinh comme MCF en sept. 2003. Plus récemment, après le départ de Satya Majumdar (promu DR2 en section 02 en oct. 2003) en fév. 2004, le laboratoire a fort heureusement bénéficié de 4 nouveaux recrutements, Daniel Braun PR2 en octobre 2004 (poste de Erik Sørensen actuellement professeur à Mc Master University), Manoel Manghi MCF (campagne « 1000 postes ») en février 2005, Olivier Giraud et Fabien Alet, CR2-CNRS (en sections 02 et 06 respectivement) en octobre 2005. L'équilibre satisfaisant CNRS/MENRT est toujours respecté (8 chercheurs CNRS & 9 enseignants-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. Il faut aussi signaler que le poste de Robert Fleckinger prochainement vacant devrait être publié en Octobre 2006 avec le profil « Théorie de la matière condensée (méthodes analytiques) ». Pour finir, signalons que Mohamed Belkacem est en disponibilité à partir de septembre 2005.

1.3 Liste des équipes

Le projet de recherche pour le prochain plan quadriennal (2007-2010) maintient les 4 thèmes présentés ci-dessous.

TAB. 1.1 –: *Enseignants-chercheurs/chercheurs du Laboratoire de Physique Théorique. Les 4 permanents en détachement/mise en disponibilité sont en italique ainsi que S. Majumdar récemment muté*

Nom	Poste et date d'arrivée	Commentaires	Section
Alet Fabien	CR2, oct. 2005		06 CNRS
<i>Bellissard Jean</i>	Prof. CE UPS, oct. 91	<i>détaché (oct. 2001), poste re-publié</i>	29 CNU
<i>Belkacem Mohamed</i>	MCF UPS, oct. 2000	<i>en disponibilité (oct. 2005)</i>	29 CNU
Capponi Sylvain	MCF UPS, oct. 2000		29 CNU
Chavanis Pierre-Henri	CR1, oct. 98	promu CR1 en oct. 2001	02 CNRS
Braun Daniel	Prof. 2e Cl., oct. 2004		29 CNU
Dean David	Prof. 2e Cl., oct. 98		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	<i>détaché EPF-Lausanne en oct. 2000</i>	02 CNRS
Giraud Olivier	CR2, oct. 2005		02 CNRS
<i>Majumdar Satya</i>	DR2, oct. 99	<i>muté au LPTMS, Orsay en fév. 2004</i>	02 CNRS
Mambrini Matthieu	CR2, oct. 2002		06 CNRS
Manghi Manoel	MCF, fév. 2005		29 CNU
Poilblanc Didier	DR2, juil. 92	promu DR2 en oct. 98	06 CNRS
Sève-Dinh Mai	MCF UPS, sept. 2003		29 CNU
Shepelyansky ^a Dima	DR1, oct. 92	promu DR1 en oct. 2005	02 CNRS
Sire Clément	DR2, oct. 91	promu DR2 en oct. 2005	02 CNRS
<i>Sørensen Erik</i>	Prof. 2e Cl. UPS, déc. 96	<i>en disponibilité (déc. 2001), poste re-publié</i>	29 CNU
Suraud Eric	Prof. CE. UPS, oct. 92	promu PRCE en 2004	29 CNU

^a orthographe des papiers d'identité « Chepelianskii »

- 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

La liste des membres devant faire partie de la future UMR est donnée dans la Table 1.2. Il faut également y rajouter Frédéric Mila (Table 1.1) dont la nouvelle demande de détachement auprès de l'EPF-Lausanne vient d'être acceptée.

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 Thèses soutenues et en cours depuis janvier 2002

1. Eric Giglio (janvier 2002, Dir. E. Suraud): « Dynamique moléculaire dans les agrégats fortement excités: approche semi-classique ». (Situation professionnelle: CNRS)
2. Fabien Alet (juin 2002, Dir. E. Sørensen): « Étude numérique de systèmes magnétiques et supraconducteurs ». (Situation professionnelle: CNRS)

<i>Nom</i>	<i>Poste</i>	<i>Thématique/équipe</i>	<i>Section</i>
Alet Fabien	CR2	Fermions fortement corrélés	06 CNRS
Braun Daniel	Prof. 2e Cl.	Cohérence quantique	29 CNU
Capponi Sylvain	MCF UPS	Fermions fortement corrélés	29 CNU
Chavanis Pierre-Henri	CR1	Physique statistique	02 CNRS
Dean David	Prof. 2e Cl.	Physique statistique	29 CNU
Destainville Nicolas	MCF UPS	Physique statistique	29 CNU
Fleckinger Robert	Prof. 2e Cl. UPS	Cohérence quantique	29 CNU
Frahm Klaus	Prof. 2e Cl. UPS	Cohérence quantique	29 CNU
Georgeot Bertrand	CR1	Cohérence quantique	02 CNRS
Giraud Olivier	CR2	Cohérence quantique	02 CNRS
Mambrini Matthieu	CR2	Fermions fortement corrélés	06 CNRS
Manghi Manoel	MCF	Physique statistique	29 CNU
Poilblanc Didier	DR2	Fermions fortement corrélés	06 CNRS
Sève-Dinh Phuong Mai	MCF UPS	Agrégats	29 CNU
Shepelyansky Dima	DR2	Cohérence quantique	02 CNRS
Sire Clément	CR1	Physique statistique	02 CNRS
Suraud Eric	Prof. CE UPS	Agrégats	29 CNU

TAB. 1.2 – : Répartition thématique des enseignants/chercheurs affectés et effectivements présents au Laboratoire de Physique Théorique au 1er octobre 2005

3. Gaëtan Caldara (décembre 2002, Dir. K. Frahm): « Effets des interactions sur les systèmes 2d désordonnés ». (Situation professionnelle: prof. CPGE)
4. Raphaël Cherrier, (juillet 2003, Dir.: D.S. Dean): « Étude de systèmes de spins complexes ou désordonnés: analogies avec la transition vitreuse structurale ». (Situation professionnelle: MCF)
5. Alexandre Lefèvre, (juillet 2003, Dir.: D.S. Dean): « États métastables dans les systèmes vitreux: des verres de spins aux milieux granulaires ». (Situation professionnelle: CNRS)
6. David Magnoux, (juillet 2003, Dir. D. Poilblanc) (soutenue en juillet 2003): « Mise en ordre de charge et de spin dans les manganites à magnétorésistance colossale: couplage au réseau et dégénérescence orbitale ». (Situation professionnelle: prof. lycée)
7. Leang Ming Ma (mars 2004, Dir. E. Suraud): « Interaction Laser intense - Agrégat ».
8. Nicolas Lafforencie, (juillet 2004, Dir. D. Poilblanc et K. Frahm) (soutenue le 5 juillet 2004): « Influence des impuretés et du désordre dans des systèmes de basse dimensionnalité ». (Situation professionnelle: post-doc Université British Columbia)
9. Andrei Pomérensky (octobre 2004, Dir. D. Shepelyansky et B. Georgeot): « Intrication et imperfections dans le calcul quantique ». (Situation professionnelle: chercheur Novossibirsk)
10. Benjamin Lévi (novembre 2004, Dir. B. Georgeot et D. Shepelyansky): « Simulation de systèmes quantiques sur un ordinateur quantique réaliste ». (Situation professionnelle: post-doc)
11. Vianney Desoutter (juillet 2005, Dir.: N. Destainville): « Étude de deux systèmes dynamiques dominés par des phénomènes entropiques ». (Situation professionnelle: post-doc Université de Palerme)
12. Fabien Mégi (juin 2005, Dir. E. Suraud et M. Belkacem): « Étude théorique d'agrégats soumis à des champs lasers intenses ».
13. Julien Sopik (2003-2006, Dir.: C. Sire), « Dynamique et statique des systèmes à longue portée ».
14. Guillaume Roux (2004-2007, Dir. D. Poilblanc et S. Capponi).
15. Gaspard Bousquet (2004-2007, Dir. E. Suraud).
16. Mohamed Belkacem (décembre 2003): Habilitation, « Systèmes fermioniques finis hors équilibre: des noyaux aux agrégats atomiques ».
17. Sylvain Capponi (décembre 2005) Habilitation .
18. Nicolas Destainville (décembre 2005) Habilitation.

TAB. 1.3 – Étudiants doctorants en 2002-2005.

Nom	Provenance/Financement	Responsable	Soutenance
Alet Fabien	MENRT 99-2002	E. Sørensen	juin 2002
Bousquet Gaspard	MENRT 2004-2007	E. Suraud	prévue 2007
Caldara Gaëtan	ENS Ulm & AC 99-2002	K. Frahm	fin 2002
Cherrier Raphaël	ENS Lyon, MENRT, moniteur, 99-2002	D. Dean	juillet 2003
Desoutter Vianney	MENRT, moniteur, 2001-2004	N. Destainville	2004
Giglio Eric	Bourse EC 98-2001	E. Suraud	janvier 2002
Laflourencie Nicolas	MENRT, moniteur, 2000-2003, ATER 2003	K. Frahm/D. Poilblanc	juillet 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	2005
Ma Leang Ming	MENRT, 2000-2003	E. Suraud	2004
Magnoux David	MENRT, moniteur, 2000-2003	D. Poilblanc/J.F. Bobo	juillet 2003
Mégi Fabien	MENRT, 2001-2004	M. Belkacem/E. Suraud	2004
Poméransky Andrei	bourse USA/CNRS 2001-2004	D. Shepelyansky/B. Georgeot	2004
Sopik Julien	MENRT, 2003-2006	C. Sire	prévue 2006
Roux Guillaume	ENS-Lyon AMN, 2004-2007	D. Poilblanc/S. Capponi	prévue été 2007

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 une baisse importante du soutien annuel de base CNRS (département SPM) à l'occasion du passage UMR, de 25 kEuros H.T. (budget 2003), 25 kEuros H.T. (budget 2004) et **28 kEuros H.T.** (budget 2005), contre **38.1 kEuros H.T.** pour le GPT en 2002. De même, le soutien de base du MENRT maintenu la première année de fonctionnement de notre UMR avec un budget 2003 de 42.5 kEuros TTC a ensuite été substantiellement réduit en 2004 et 2005 à **34 kEuros TTC** (à comparer au budget de 36 kEuros H.T. soit **43 kEuros TTC** en 2002). Signalons aussi l'obtention d'un mi-lourd CNRS en 2005 (**15 kEuros**) (complété par un financement BQR modeste) pour l'installation d'un calculateur (cluster d'Opteron).

En ce qui concerne le personnel ITA, Sylvia Scaldaferrò (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 (UMR 5626) 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 ne semble pas envisagée dans un futur proche. En revanche, le LPT demande, avec le soutien de l'IRSAMC, un poste de TI pour janvier 2006 (maintenance informatique).

Pour ses calculs, le laboratoire dispose d'un parc entretenu de machines LINUX récentes dont plusieurs serveurs, de nombreux terminaux et 12 PC de calcul de type bi-processeurs à 2 Ghz (ou plus) avec 2Gb ou 4Gb de mémoire. Une amélioration nette a été apportée en 2003 grâce à une nouvelle organisation en « cluster » géré par PBS. Un échelon supplémentaire au niveau de la puissance de calcul locale a été franchi en septembre 2005 grâce à l'achat et à l'installation par ALINEOS des premiers éléments d'un cluster d'Opteron (7 noeuds bi-processeur et connection très haut-débit Myrinet). En outre, les membres du laboratoire sont aussi, pour la plupart, de gros utilisateurs des ressources (vectorielles et parallèles) mises à disposition par les centres de calcul nationaux comme IDRIS (Orsay).

TAB. 1.4 –: *Post-doctorants, professeurs invités (PI) & visiteurs ayant effectués des séjours d'au moins 1 mois pendant la période 2002-2005.*

<i>Nom</i>	<i>Financement</i>	<i>Responsable/Contact</i>	<i>Dates</i>
Becca Federico	chercheur associé CNRS	D. Poilblanc	oct. 2005-dec. 2005
Benenti Giuliano	chercheur associé CNRS	D. Shepelyansky	fev. 2002-avril 2002
Bettelli Stefano	post-doc EC	D. Shepelyansky	avr. 2002-oct. 2003
Dinh Phuong Mai	ATER (UPS)	E. Suraud	sept. 2002-août 2003
Khandelwal Swati	post-doc (MENRT)	S. Majumdar	sept. 2002-mai 2003
Gazza Claudio	visiteur MRT	D. Poilblanc	nov. 2001-fév. 2002
Giraud Olivier	post-doc CNRS	D. Shepelyansky	sept. 2004-sept. 2005
Ipatov Andrei	chercheur associé CNRS	E. Suraud	oct. 2002-déc. 2002
Lagès José	post-doc MEN	D. Shepelyansky	oct. 2004-sept. 2005
Läuchli Andreas	post-doc (CA CNRS & Swiss Nat. Fund)	D. Poilblanc	sept. 2002-mai 2004
Lee Jae-Weon	post-doc EC	D. Shepelyansky	janv. 2003-janv. 2005
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
Terraneo Marcello	post-doc EC	D. Shepelyansky	oct. 2001-oct. 2003
Zhirov Oleg	visiteur scientifique	D. Shepelyansky	2003-2005 (8 mois)
Zwicknagel Gunter	PI	M. Belkacem	avril 2003
Horgan Ron	visiteur scientifique	D. Dean	juil.-août 2003-2005

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 inter-disciplinaires 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): F. Alet¹, S. Capponi, M. Mambrini, & D. Poilblanc

2.1.1 Objectifs et contexte

Présentation générale

L'étude des systèmes de **Fermions Fortement Corrélés** a réservé ces 20 dernières années de nombreuses surprises qui sont à l'origine d'une activité très forte aussi bien expérimentale que théorique. C'est de plus un domaine dans lequel, de par la nature des problèmes rencontrés, l'interaction expérience-théorie est des plus actives.

Une des manifestations les plus frappantes des corrélations fortes est par exemple la **supraconductivité non conventionnelle**². Ceci dit, parallèlement au phénomène de la supraconductivité, les corrélations fortes sont aussi à l'origine de nombreux comportements exotiques. Par exemple, la phase **isolant de Mott**, dont dérivent les supraconducteurs à Haute Température Critique, exhibe des propriétés surprenantes et pose à elle seule des problèmes passionnants à basse température.

Les activités du groupe s'articulent autour de la problématique suivante: comprendre la relation entre le magnétisme des isolants de Mott (notamment lorsqu'ils sont frustrés) et les phases exotiques (en particulier la phase supraconductrice) qui apparaissent avec l'introduction de charges mobiles.

Les isolants de Mott frustrés

Cadre général – Dans un isolant de Mott, les degrés de liberté de charge sont gelés, les seuls degrés de liberté résiduels sont les degrés de liberté de spin (moments magnétiques dits localisés) et l'interaction effective de nature **quantique** est de type Heisenberg.

Problématique de la frustration en basse dimension – En l'absence de frustration, le problème révèle a priori sa complexité et sa richesse lorsqu'on se place dans le cas **antiferromagnétique** avec des **bas spins** (1/2 ou 1), en **basse dimensionnalité** ($d = 1$ ou 2) et que l'on étudie des **propriétés de basse température**. Mais, alors que l'on pourrait s'attendre à ce que les fluctuations quantiques dues au terme

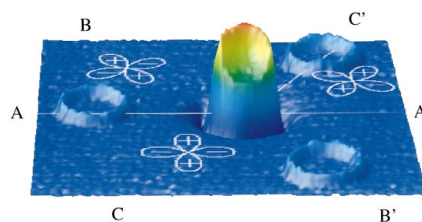


FIG. 2.1 –: Preuve expérimentale de la symétrie d du paramètre d'ordre supraconducteur (extrait de C. C. Tsuei and J. R. Kirtley, *Rev. Mod. Phys.* **72**, 969 (2000)).

1. Permanent à partir du 1er octobre 2005.

2. P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987) et références incluses.

d'échange déstabilisent fortement l'état de Néel $|\uparrow\downarrow\uparrow \dots \uparrow\downarrow\rangle$, on constate qu'au contraire, les corrélations antiferromagnétiques restent aussi importantes que possible (« état de Néel habillé »).

La situation change radicalement lorsque le modèle étudié est frustré. De tels systèmes sont contraints d'adopter des configurations réalisant un compromis énergétique global à défaut de pouvoir satisfaire toutes les contraintes locales. L'effet classique de la frustration est souvent d'introduire une dégénérescence du fondamental ou tout au moins une accumulation d'états de basse énergie. Au niveau quantique, on conçoit qu'elle puisse stabiliser des états sans ordre à longue distance. C'est effectivement ce qui est observé à la fois expérimentalement et sur les modèles théoriques et l'on voit apparaître des **fondamentaux sans ordre magnétique** (les corrélations décroissent exponentiellement). La longueur de corrélation finie de ces systèmes est responsable de l'ouverture d'un gap (différence d'énergies totales finie) entre le fondamental singulet et la première excitation magnétique. En l'absence d'excitations de basse énergie, les propriétés de basse température (susceptibilité, chaleur spécifique) de ces modèles sont alors particulières.

De manière encore plus surprenante, il semble qu'une classe de modèles antiferromagnétiques frustrés présente un comportement encore plus exotique que l'on qualifie de « **liquide de spins** ». Ils présentent un fondamental désordonné sans brisure des symétries spatiales. Le prototype de tels systèmes est le modèle de Heisenberg sur le réseau *kagomé*. L'enjeu principal des études portant sur ce modèle est de **caractériser et de comprendre la nature des excitations de basse énergie** et en particulier la prolifération exponentielle inhabituelle de singulets dans le gap singulet-triplet.

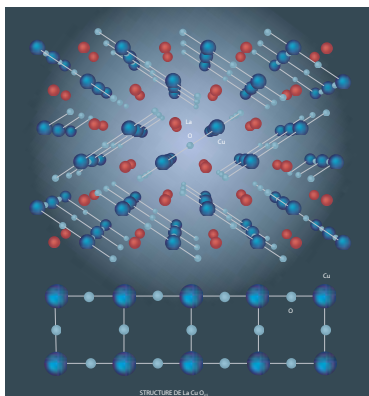
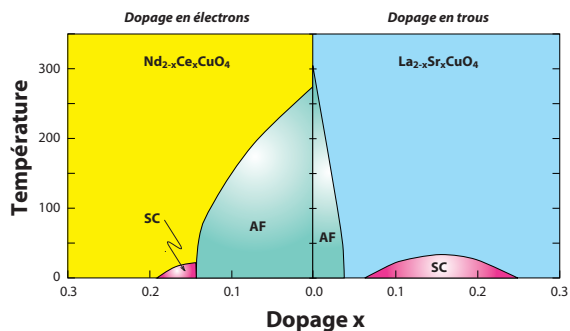
Isolants de Mott dopés : supraconductivité non conventionnelle et frustration magnétique

Dans la mesure où l'isolant de Mott frustré possède des propriétés magnétiques remarquables, le **dopage**, c'est-à-dire l'introduction d'électrons ou de trous mobiles, de tels systèmes pourrait certainement conduire à un comportement métallique aux propriétés tout à fait non conventionnelles : **l'interaction effective** entre les charges mobiles introduites est gouvernée par l'environnement magnétique qui joue le rôle de médiateur. Certains phénomènes nouveaux dans ce contexte comme la **séparation spin-charge** ou **l'instabilité supraconductrice** (les degrés de liberté de charge, libres de se déplacer dans l'état liquide de spin, formeraient un état supraconducteur par condensation de Bose) font partie des préoccupations actuelles des théoriciens.

Supraconductivité à haute température critique – Depuis leurs découvertes en 1986, les oxydes de cuivre supraconducteurs à haute température critique ont motivé une multitude d'études, tant expérimentales

que théoriques, du fait du caractère non conventionnel de cette supraconductivité dont le paramètre d'ordre possède une symétrie *d*.

Cette **supraconductivité non conventionnelle**, qui de plus est proche d'une phase isolante antiferromagnétique (cf. diagramme de phases ci-contre), renforce l'idée d'une origine magnétique à ce phénomène mais le mécanisme reste encore un mystère aujourd'hui.



Les composés ayant une géométrie en **échelles** présentent également une variété de phases : isolantes (SrCu_2O_3), supraconductivité sous pression ($\text{Sr}_2\text{Ca}_{12}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$) etc. Sur la figure ci-contre est représentée la structure tridimensionnelle du composé $\text{LaCuO}_{2.5}$ montrant la présence d'échelles.

Ces systèmes constituent un terrain d'études privilégié grâce à la dimensionnalité réduite qui renforce les effets quantiques et permet de simuler des systèmes de grande taille.

Compétition entre phases magnétique et supraconductrice – Ces états de la matière semblent antagonistes puisque une paire supraconductrice singulet n'a pas de propriétés magnétiques.

Cependant, ces phases sont très proches dans les diagrammes de phases des supraconducteurs à haute

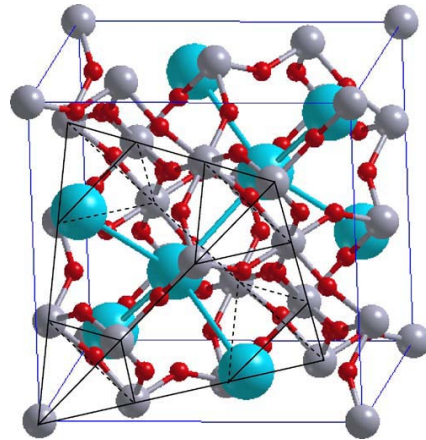
température critique voire coexistent dans ceux de supraconducteurs organiques³ ou fermions lourds⁴. En appliquant un champ magnétique dans un supraconducteur, il apparaît des vortex; ces objets ne sont plus supraconducteurs mais étonnamment, il a été observé qu'ils étaient antiferromagnétiques⁵, ce qui confirme clairement la compétition et le lien entre ces phases.

Dans certains systèmes comme Sr_2RuO_4 , analogue du liquide quantique⁶ ^3He , ou certains fermions lourds, la supraconductivité (superfluidité dans le cas de ^3He) est très probablement médiée par les interactions magnétiques. Il s'agit là de supraconductivité triplet puisque les spins sont parallèles. C'est donc un cas où une supraconductivité exotique est le résultat de fortes interactions magnétiques. Dans d'autres composés fermions lourds, on retrouve la coexistence entre une phase supraconductrice et une phase antiferromagnétique⁷.

Rôle de la frustration – Du point de vue théorique, nous avons mentionné l'intérêt existant pour les systèmes frustrés dopés. Cette motivation se trouve renforcée par la découverte récente de supraconductivité dans un grand nombre de composés pyrochlores⁸ (structure illustrée ci-dessous) ainsi que dans des oxydes de cobalt⁹.

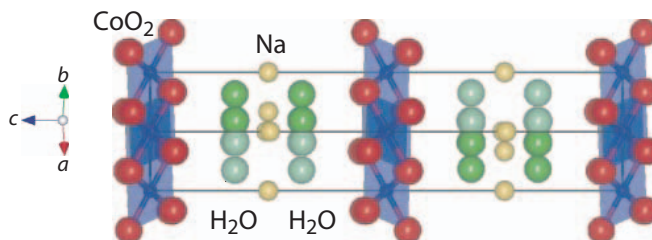
Citons par exemple le composé $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ formant un réseau tridimensionnel de tétraèdres connectés par les sommets. La frustration magnétique joue probablement un rôle dans le mécanisme de cette supraconductivité.

Ces composés sont fortement frustrés à la différence des composés oxydes de cuivre, et suscitent actuellement de nombreuses études théoriques et expérimentales pour comprendre le mécanisme. En particulier, il semble très probable d'avoir une supraconductivité exotique, par exemple brisant la symétrie par renversement du temps.



Dans le cas du réseau triangulaire, Kalmeyer et Laughlin ont proposé une fonction d'onde variationnelle RVB qui représente un liquide de spin chirale, brisant la symétrie par renversement de temps ainsi que la symétrie par réflexion¹⁰. Cette approche établit un lien formel avec la théorie de l'effet Hall quantique fractionnaire qui reste un des plus célèbres exemples de phase électronique exotique.

De la même manière, la supraconductivité observée dans les **oxydes de cobalt**¹¹ résulte probablement de la frustration magnétique existant dans ce composé, constitué de plans triangulaires. Ci-dessous, le composé $\text{Na}_x\text{CoO}_2 \cdot y\text{H}_2\text{O}$. La synthèse de ces nouveaux matériaux vient renforcer l'intérêt pour l'étude du dopage de réseaux frustrés et va nous permettre de comparer nos prédictions théoriques aux nombreuses expériences.



Ces systèmes présentent donc pour le théoricien un spectre très large de comportements exotiques qui, pour la plupart, restent à explorer en détail.

3. S. Lefebvre *et al.*, Phys. Rev. Lett. **85**, 5420 (2000).

4. M. Sigrist, cours de l'EPFL (2005).

5. V. F. Mitrovic *et al.*, Nature **413**, 501 (2002).

6. D. D. Osheroff, R. C. Richardson et D. M. Lee, Phys. Rev. Lett. **28**, 885 (1972).

7. Par exemple, voir T. Mito *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 077 004 (2003).

8. M. Hanawa *et al.*, Phys. Rev. Lett. **87**, 187001 (2001).

9. K. Takada *et al.*, Nature **422**, 53 (2003).

10. V. Kalmeyer et R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **59**, 2095 (1987).

11. K. Takada *et al.*, Nature **422**, 53 (2003).

2.1.2 Résultats marquants et perspectives

L'équipe FFC s'est concentrée sur la modélisation des systèmes corrélés et l'utilisation de méthodes numériques autorisant une comparaison directe avec l'expérience. Nous illustrons cette activité par certains des thèmes porteurs que nous souhaitons poursuivre et développer. Pour chacun d'eux nous mentionnerons quelques résultats marquants obtenus dans les 4 dernières années (2002-2005), nous dégagerons les collaborations internationales s'y rattachant ainsi que les perspectives de développements futurs dans le cadre de ce projet.

1. Systèmes isolants magnétiques

Effet magnéto-élastique dans les systèmes de spins quantiques 1D ou 2D. En collaboration avec Federico BECCA et Frédéric MILA, l'effet d'un couplage spin-réseau a été étudié dans le cas d'une chaîne de spin-1/2 frustrée [10] couplée à des phonons adiabatiques :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2}K \sum_i \delta_i^2 + J_1 \sum_i (1 - A_1 \delta_i) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \sum_i [1 - A_2 (\delta_i + \delta_{i+1})] \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+2}$$

Alors qu'en l'absence de distorsion du réseau, la frustration conduit à une dimérisation spontanée, **transition de spin-Peierls**, nous avons montré qu'en tenant compte des phonons, pouvait être stabilisée une nouvelle phase tétramérisée avec 3 liens inéquivalents. Il est suggéré qu'une telle phase puisse être observée dans le composé quasi-1D frustré LiV_2O_5 :

- par RMN en sondant les sites V^{4+} inéquivalents,
- par diffraction grâce à l'apparition de pics de surstructure.

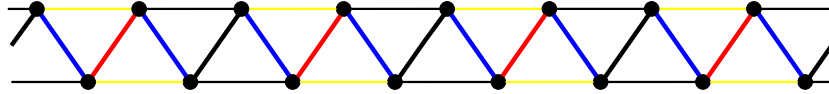


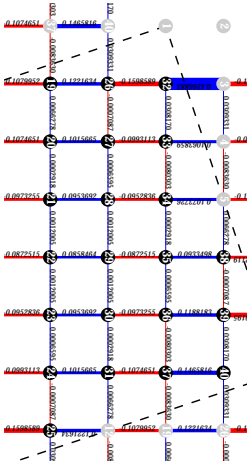
FIG. 2.2 – : Modulation des termes d'échange magnétique par la distorsion du réseau: $\delta_i = \delta_0 \cos(i\pi/2)$.

Perspectives: plateaux d'aimantations sous champ magnétique.

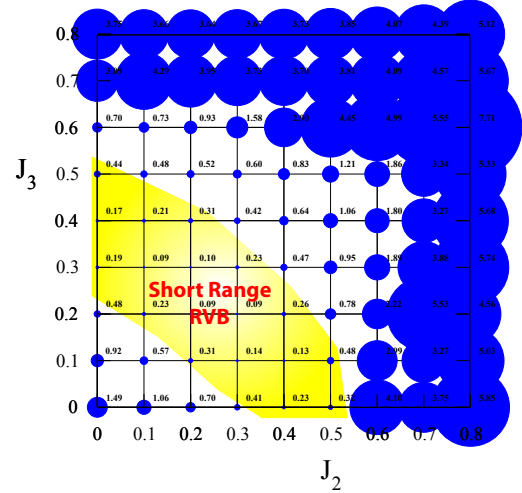
Dans la continuation de ce thème, nous projetons d'étudier l'effet simultané d'un champ magnétique (couplage Zeeman) et du réseau dans divers systèmes de spins de basse dimension. Le champ magnétique est un paramètre extérieur très utile que l'on peut comparer dans le cas de systèmes de spins quantiques au potentiel chimique pour des systèmes de fermions. En particulier, il permet de contrôler des transitions de phases quantiques (comme le potentiel chimique contrôle la transition métal-isolant). Ainsi, il est maintenant clairement établi que la frustration magnétique permet de stabiliser des plateaux d'aimantation en fonction du champ magnétique, signatures de phases dites « incompressibles » (comme les phases isolantes pour les fermions). Un certain nombre de plateaux à des valeurs fractionnaires de l'aimantation restent pourtant inexplicés dans certaines échelles de spins et il est très probable que, dans ce cas, le réseau joue un rôle essentiel en stabilisant des phases « proches en énergie ». Cette problématique peut aussi naturellement s'étendre au cas des systèmes de spins-1/2 bidimensionnels. Nous avons la volonté de développer un projet ambitieux sur ce thème en collaboration avec Daniel CABRA (LPT, Strasbourg) et Pierre PUJOL (ENS-Lyon) pour leurs compétences en matière d'approches analytiques et Frédéric MILA (EPFL-Lausanne). En ce qui concerne les approches numériques, les techniques de Lanczos et DMRG – en collaboration ici avec Ariel DOBRY et Claudio GAZZA (Rosario, Argentine) – se prêtent parfaitement à cette problématique ainsi que le Monte Carlo Quantique pour le cas de systèmes non-frustrés (mais couplés avec le réseau). Notons que des calculs préliminaires montrent bien que le couplage avec le réseau seul, sans frustration, peut stabiliser de telles phases modulées.

Etats « Cristal de liens de valence » dans le modèle $J_1 - J_2 - J_3$: étude dans une base RVB non orthogonale. Le modèle $J_1 - J_2$ sur le réseau carré fait partie des premiers modèles bidimensionnels de magnétisme frustré étudiés. Pourtant, de nombreuses questions, dont la plus cruciale est sans doute de comprendre la nature de l'état fondamental dans le régime très frustré, restent largement ouvertes alors même que l'intérêt pour le modèle n'est plus seulement théorique (existence de la famille de composés $\text{Li}_2\text{VO}(\text{Si,Ge})\text{O}_4$).

Récemment, l'étude d'une version généralisée de ce modèle incluant aussi des interactions entre troisièmes voisins a été entreprise par Matthieu MAMBRINI en collaboration avec Andreas LÄUCHLI, Frédéric MILA et Didier POILBLANC. Il s'agit de tenter de répondre aux questions soulevées par le modèle en allant au-delà des diagonalisations exactes.



L'utilisation des états RVB à courte portée conjointement aux diagonalisations exactes a permis de dégager une région du diagramme de phase où le **fondamental du modèle est très bien décrit à l'aide d'une fonction d'onde RVB à courte portée** (voir figure ci-contre). Par ailleurs, le calcul des corrélations et leur analyse de taille finie a permis de mettre en évidence un **ordre de type « cristal de lien de valence »**. La publication de ces résultats est en cours.



Perspectives : utilisation de bases de liens de valence adaptées.

Au-delà de ce projet, l'utilisation de bases réduites telles que celle des liens de valences à courte portée se révèle peu à peu comme un outil de choix dans l'étude des modèles quantiques très frustrés. Cette technique numérique, développée au sein du groupe et qui en reste une exclusivité, permet d'aborder des systèmes dont la taille est sensiblement plus grande que celles accessibles par diagonalisations exactes. Il est raisonnable de penser que cette technique permettra dans un avenir proche de revisiter avec succès des questions encore non tranchées et d'aborder de nouveaux problèmes où la frustration joue un rôle déterminant.

Modèles effectifs pour des systèmes magnétiques. La compréhension du spectre de basse énergie des systèmes magnétiques « exotiques » reste un problème majeur en magnétisme quantique de basse dimension. Une approche consiste à décrire le système à l'aide de nouveaux degrés de liberté *émergents*.

La méthode CORE (*Contractor Renormalization*) est une transformation d'un modèle sur réseau vers un nouvel hamiltonien effectif possédant le même spectre à basse énergie¹². L'algorithme CORE permet de calculer les interactions effectives à toute distance en diagonalisant exactement des systèmes de taille finie. La troncation des interactions au-delà d'une certaine portée est une approximation qui peut être contrôlée en estimant l'ordre de grandeur des termes d'ordre supérieur.

Au sein du Laboratoire de Physique Théorique, cet algorithme a été mis au point par Sylvain CAPPONI d'un point de vue numérique et a été appliqué en collaboration avec Andreas LÄUCHLI et Matthieu MAMBRINI à plusieurs modèles magnétiques dans diverses géométries (échelles, réseau carré, etc.) qui correspondent à des situations physiques très différentes [24]. Dans tous les cas, le modèle effectif reproduit qualitativement et quantitativement la physique de basse énergie.

12. C. J. Morningstar et M. Weinstein, Phys. Rev. D **54** 4131 (1996).

Perspectives: justification microscopique de modèles de dimères quantiques

Cette approche ayant été testée avec succès, nous projetons d'étendre nos études à plusieurs systèmes possédant un intérêt expérimental potentiel : par exemple, des modèles frustrés de spin 1 (pyrochlore, Kagomé) etc.

Une autre application de la méthode CORE est la justification de modèles effectifs existants qui peuvent maintenant être dérivés à partir d'un modèle microscopique. Il serait intéressant par exemple de pouvoir justifier les modèles de dimères quantiques actuellement très discutés.

2. Systèmes isolants avec impuretés

Impuretés statiques dans un liquide de spin ou un cristal de liens. L'étude du dopage (contrôlé) de liquides de spins par des impuretés statiques non magnétiques (c'est-à-dire lacunes fixes) présente au moins un triple intérêt :

- elles sont présentes dans des composés 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.

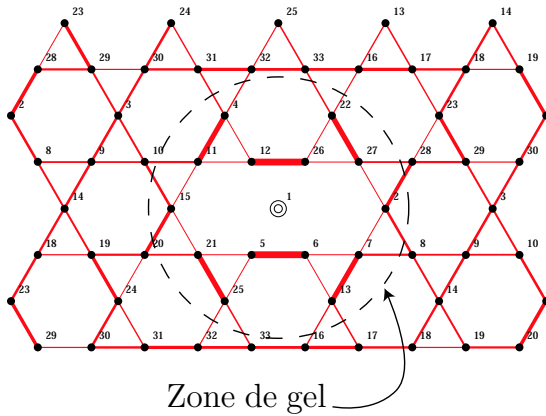


FIG. 2.3 – Mécanisme de gel local du liquide de spin autour d'une impureté statique sur le réseau kagomé.

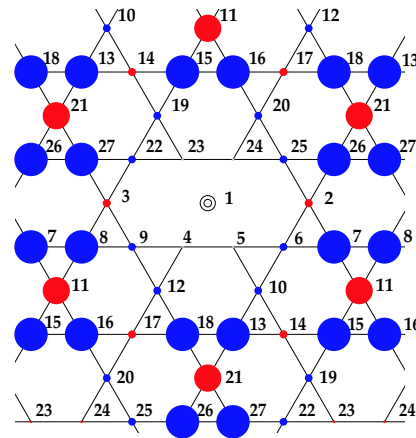


FIG. 2.4 – Déconfinement du moment induit par une impureté sur le réseau kagomé.

Dans le cas de faibles concentrations d'impuretés, il est souvent pertinent de considérer le cas d'une impureté (ou lacune) unique, voire de deux impuretés. Dans ce contexte, nous avons ainsi étudié les effets du dopage du réseau kagomé [34]. Nous avons montré que les impuretés diminuent le nombre d'états singulets de basse 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.

Perspectives :

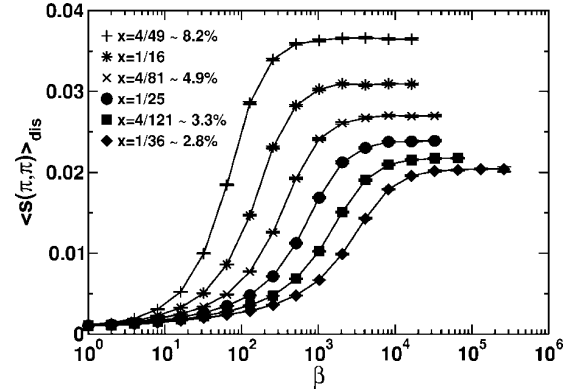
Un calcul similaire a été réalisé récemment dans le cas du modèle de Heisenberg de spins-1/2 sur le réseau carré avec interactions jusqu'au troisième voisin ($J_1 - J_2 - J_3$), modèle au diagramme de phase particulièrement riche avec, notamment, une phase cristal de liens de valence (cf. paragraphe précédent). Cette étude a permis de montrer l'émergence de deux longueurs caractéristiques correspondant d'une part à la décroissance rapide des corrélations magnétiques et d'autre part à la distance de « confinement » du moment magnétique effectif libéré par un lien de valence. La construction et l'étude d'un modèle effectif (cf. paragraphe suivant) décrivant l'interaction entre ces spins 1/2 effectifs est en projet (avec Tomaso ROSCILDE).

Influence des impuretés et du désordre dans des systèmes magnétiques uni- et bi-dimensionnels. La physique des systèmes de spins quantiques à basse dimension D , typiquement $D = 1, 2$, doit

très souvent prendre en compte la présence, en proportion plus ou moins contrôlée, d'impuretés. Un des exemples les plus illustre est le composé quasi-1D, dimérisé à basse température, CuGeO_3 . Lorsque l'on remplace une faible quantité x de Cu (ion portant un spin 1/2) par du Zn ou du Mg (non magnétique), à basse température la phase dimérisée va coexister avec un ordre antiferromagnétique, induit par les impuretés.

Afin d'éclaircir la physique de tels systèmes, nous avons construit un modèle microscopique de chaînes de spin-1/2 couplées et dopées avec des impuretés non magnétiques [12].

Son étude par des diagonalisations exactes nous a permis tout d'abord de quantifier le mécanisme de confinement solitonique provoqué par un couplage à 4 corps, mais aussi de dériver un modèle effectif où plusieurs impuretés induisent une interaction non-frustrante entre les spins 1/2 libérés. Dès lors, la suite de l'étude s'est tout naturellement portée vers des calculs Monte Carlo quantique en collaboration avec Anders W. SANDVIK, inventeur de la méthode *Stochastic Series Expansion* (SSE) [19,20,26] jusqu'à des températures très basses afin d'observer la **mise en ordre magnétique**.



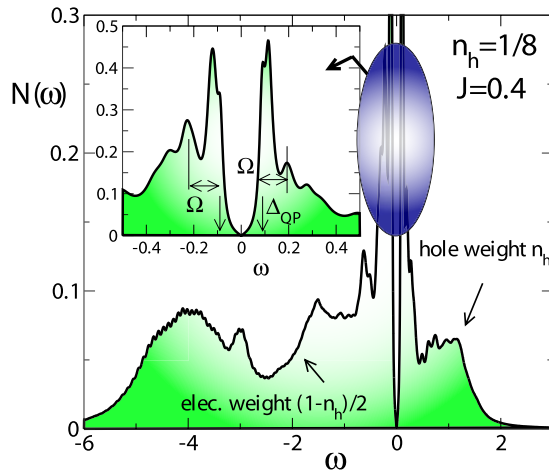
Perspectives: modèles de spins sur réseaux désordonnés.

Malgré le départ en post-doc de Nicolas LAFLORENCIE, très impliqué sur ce thème, nous projetons de poursuivre cette voie par l'étude de l'effet de la dilution de site dans des modèles de Heisenberg quantique, en particulier dans le cas d'une bi-couche où la transition de phase quantique désordre-ordre peut être contrôlée par l'application d'un champ magnétique.

Signalons à ce sujet que la demande de post-doc Marie-Curie Intra-European Fellowship déposée par Tomaso ROSCILDE (Univ. of South California, LA) et notre laboratoire sur le thème '*Novel Quantum Phases in Strongly Correlated Systems on Disordered Lattices*' a été retenue MAIS la réponse est arrivée malheureusement trop tard.

3. Isolants de Mott dopés en trous

Échelles de spins dopées [15,14,21]. Les propriétés électroniques (par ex. densité d'états, cf. figure) et magnétiques des échelles de spins dopées ont été étudiées en détails par des méthodes numériques fiables en dimension 1.

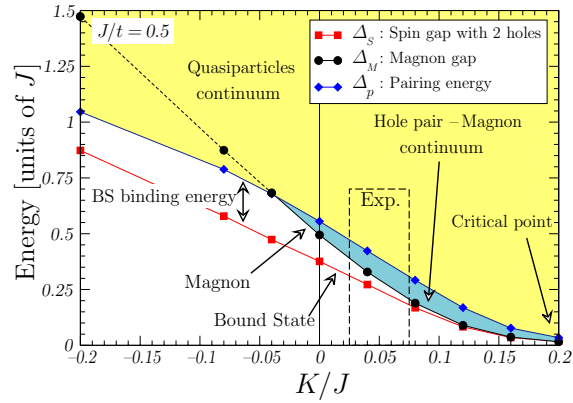


Grâce à une analyse théorique par la technique de bosonisation faite par Edmond ORIGNAC (ENS, Paris) [14], les données numériques peuvent être interprétées afin d'en extraire les échelles d'énergies du problème. Nous pouvons également calculer la dépendance en impulsion et en fréquence du gap supraconducteur, 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.

L'étude de la dynamique de spin dans une échelle dopée [21] montre que l'état lié **paire-magnon** qui existe à faible dopage évolue en une excitation magnétique bien définie à dopage fini. Cette excitation pourrait donner des indications sur le mystérieux mode magnétique observé et discuté dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique.

Récemment, motivés par la mise en évidence expérimentale de la pertinence d'un terme d'échange cyclique dans les cuprates, nous avons étudié son rôle sur les propriétés supraconductrices des échelles de spins dopées. Nous avons montré la robustesse du mode magnétique résonant pour les valeurs expérimentales proposées. D'autre part, les excitations élémentaires de basse énergie sont très sensibles à la proximité du point critique quantique séparant la phase liquide de spins étudiée d'une phase dimérisée [30].

Enfin, le dopage a un effet drastique sur les corrélations magnétiques, réouvrant par exemple un gap de spin au point critique.



Perspective: effet d'un champ magnétique sur une échelle de spins.

L'échelle constitue la géométrie la plus simple pour étudier l'effet orbital du champ magnétique dans les systèmes fortement corrélés pouvant conduire à de nouvelles phases exotiques: phases de vortex ou excitations de charge fractionnaires par exemple. Des calculs analytiques ont montré que sous l'effet d'un champ magnétique, une échelle bosonique pouvait présenter une cascade de transitions de phases; une phase similaire à une phase Meissner à faible champ magnétique puis, au delà d'un champ critique, une série de phases de vortex. Expérimentalement, de telles phases pourraient être observées dans les réseaux de jonctions Josephson. Nous projetons d'étudier ce phénomène spectaculaire à la fois sur le modèle d'origine (bosons) mais également sur des modèles de fermions, voire une échelle t-J, modèle réaliste pour décrire certains matériaux supraconducteurs. Dans ce cas, une similitude avec un modèle de bosons (paires de Cooper de trous de caractère effectif bosonique) laisse présager un comportement similaire qui n'a encore jamais été observé. Cette étude a débuté avec des calculs de Diagonalisation Exacte et pourrait se poursuivre par l'utilisation du DMRG. L'effet d'un couplage Zeeman sur la formation de plateaux d'aimantation est également envisagé.

Dynamique des trous dans les liquides de spins et les états « cristal de valence ». Contrairement au cas des systèmes non frustrés (échelles, réseau carré), le dopage de trous mobiles dans des modèles frustrés peut conduire à une **dynamique de trous exotique**. A. LÄUCHLI et D. POILBLANC ont calculé les fonctions spectrales de certains modèles frustrés et ils observent effectivement de nouveaux types de comportements.

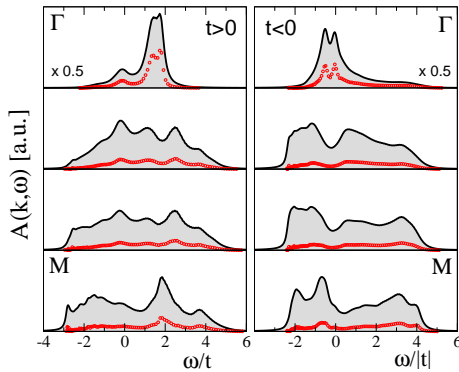


FIG. 2.5 – : Fonction spectrale d'un trou dans un réseau kagomé (modèle $t - J$) montrant une structure anormalement large, sans pic de quasi-particule comme ce serait le cas pour un liquide de Fermi [17].

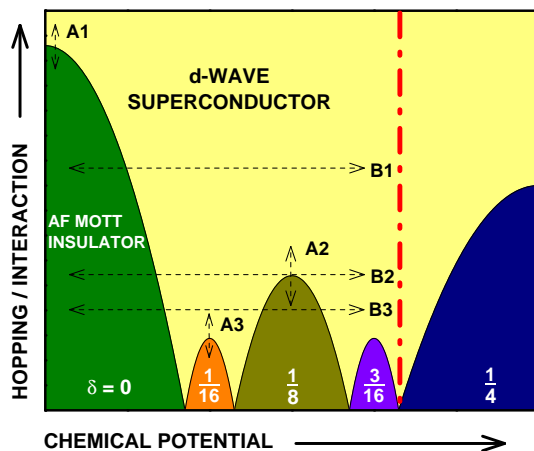
Par exemple, dans le cas du réseau kagomé bidimensionnel, la phase non dopée est un liquide de spin; en le dopant, il apparaît une **séparation spin-charge**, c'est-à-dire que les excitations de spin et de charge sont découplées, ce qui pourrait conduire à une nouvelle phase de la matière [17]. En revanche, sur un réseau pyrochlore 2D de fondamental type Cristal de Valence, les 2 composantes du trou mobile restent liées, ce qui se manifeste par un pic étroit dans la densité spectrale. Cette étude permet donc de relier les propriétés dynamiques d'un trou (mesurées par la photo-émission) aux propriétés intrinsèques de l'isolant magnétique sous-jacent.

Un nouveau mécanisme de supraconductivité non conventionnelle particulièrement robuste (aux interactions Coulombiennes répulsives par exemple) a été mis en évidence sur le réseau pyrochlore 2D dopé [22]. Il résulte d'un accroissement d'énergie cinétique des paires de Cooper de l'état supraconducteur. Les trous presque localisés dans l'état normal peuvent ainsi se délocaliser grâce à un mécanisme de **saut corrélé des paires**. Un tel effet pourrait jouer un rôle important dans un certain nombre de pyrochlores (3D) ou de systèmes triangulaires (2D) supraconducteurs.

Perspectives: dynamique des trous dans un modèle de dimères quantiques

Les modèles de dimères quantiques sont des modèles effectifs qui permettent de mieux comprendre la nature des transitions de phases quantiques entre phases liquides et phases solides et qui peuvent présenter des phases brisant une symétrie topologique (sur le réseau triangulaire) présentant ainsi un intérêt pour la « protection topologique » en information quantique. Nous projetons de développer l'étude approfondie du dopage en trou (monomères de type fermions) de tels systèmes en nous appuyant sur notre connaissance à la fois du système non dopé (travaux de Fabien ALET notamment) et des liquides de spins/solides de liens dopés d'autre part. Un code Lanczos est en cours de test et nous envisageons une étude par MCQ dans le cas d'un système dopé avec une paire de trous en collaboration avec l'équipe de Frédéric MILA (EPFL). Le domaine de stabilité et la nature de la phase supraconductrice est au coeur des préoccupations.

Hamiltonien effectif pour des systèmes dopés. À l'aide d'un modèle effectif, obtenu par la méthode CORE précitée, S. CAPPONI et D. POILBLANC ont pu étudier des échelles dopées ayant les plus grandes tailles accessibles [9,15,21]. Nous avons obtenu un excellent accord avec les approches analytiques et numériques existantes pour l'échelle à deux montants. En outre, pour les échelles à deux et quatre montants, nous trouvons un appariement entre les paires et les triplets, qui est un ingrédient à comparer directement aux théories phénoménologiques¹³ de type SO(5). Nous avons également accès de manière non biaisée (puisque conservant la symétrie par translation) aux fonctions de corrélation de densité : alors que des corrélations de type « onde de densité de charge » à $4k_F$ sont observés pour l'échelle à deux montants, notre calcul indique une tendance à former des structures diagonales (*stripes*) dans des échelles à quatre montants.



Pour le cas à deux dimensions, une collaboration a été établie avec le groupe de Shoucheng ZHANG (Stanford) et F. ALET (SPhT, Saclay). Nous avons proposé un **modèle effectif bosonique** permettant de décrire la physique de basse énergie des cuprates supraconducteurs. Un tel modèle peut être simulé très efficacement sur de grands systèmes (dix fois plus grands que ceux accessibles par un calcul exact) et nous avons obtenu un diagramme de phase global reproduisant la plupart des phases existantes et prédisant, entre autre, l'existence de phases avec ordre de charge en présence d'un champ magnétique ou bien sous pression [23].

La figure ci-dessus représente le diagramme de phase typique du modèle effectif bosonique en fonction du potentiel chimique et du rapport entre énergie cinétique et interaction.

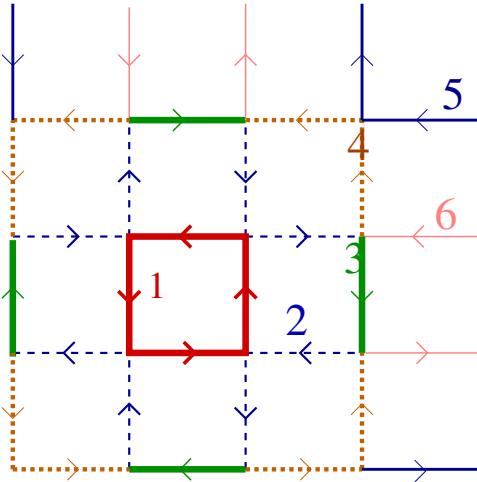
Perspectives: méthode CORE pour construire des modèles effectifs.

Cette méthode d'obtention de Hamiltoniens effectifs est générique et facilement applicable à de nombreux systèmes complexes. Ainsi, il est possible de simuler de plus grands systèmes tout en conservant les mêmes propriétés de basse énergie. Nous avons donc un projet en cours afin de comprendre le dopage de phases isolantes exotiques comme le dopage du réseau Kagomé (collaboration avec A. LÄUCHLI (EPFL)) ou bien le dopage d'un modèle de dimères quantiques.

13. S-C. Zhang, Science **275**, 1098 (1997).

Phases inhomogènes dans les supraconducteurs. Récemment, des expériences de STM à résolution atomique ont montré l'existence de modulations de charge dans des cuprates sous-dopés, lorsque la supraconductivité est détruite soit en appliquant un champ magnétique¹⁴, soit en élevant la température¹⁵, soit enfin en sous-dopant¹⁶. Une telle propriété semble donc générique et suggère qu'un ordre de charge puisse être en compétition avec la supraconductivité. C'est donc une observation fondamentale pour les théoriciens qui sont toujours à la recherche d'un modèle minimal suffisant permettant de décrire toutes les propriétés de ces oxydes.

En collaboration avec le groupe de Shoucheng ZHANG (Stanford), S. CAPPONI a montré que ces résultats pouvaient se comprendre en termes de formations de cristal de Wigner de paires de trous, et non des trous eux-mêmes [5,23]. Cette observation se comprend dès lors qu'on suppose l'existence de paires préformées dans toute la phase dite pseudogap.



Représentation schématique de la distribution des courants alternés de la phase de flux inhomogène $4a \times 4a$. Chacun lien de couleur différente correspond à une amplitude de courant de charge différente. La modulation reste faible, de l'ordre de quelques pourcents.

Une phase inhomogène avec une modulation identique (en accord avec les expériences STM) a également été obtenue dans le cadre d'un modèle de *fermions* corrélés (en 2D) à partir d'une extension de la théorie champ moyen renormalisée [28], formulation mathématique simple de la théorie RVB d'Anderson. Dans ce cas, la théorie prédit l'apparition de courants orbitaux de très petites amplitudes qui pourraient néanmoins être observés par diffusion inélastique de neutrons. Cette phase, en compétition avec la phase supraconductrice *d-wave* RVB, pourrait être stabilisée par un effet de surface.

Perspectives: analyse champ-moyen renormalisée autour d'un vortex, cas des réseaux frustrés.

Nous projetons tout d'abord, grâce à la théorie champ-moyen renormalisée, d'étudier la possibilité de « nucléer » autour d'un vortex (dans la phase mixte d'un supraconducteur à haute T_c) la phase modulée à courants orbitaux au sein d'un environnement supraconducteur. La stabilité possible d'une modulation « à 45 degrés » pour un dopage de 1/16 (supercellule de taille $\sqrt{32} \times \sqrt{32}$) mérite également d'être étudiée. Le deuxième projet concerne la compétition entre de telles phases inhomogènes et la supraconductivité sur le réseau triangulaire dans le cadre d'un projet plus large (comprenant des calculs ab-initio) sur les cobaltites supraconducteurs et en collaboration avec Frédéric MILA (EPFL).

4. Méthodes numériques et algorithmiques

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 est double :

- les problèmes posés sont pour l'essentiel trop complexes pour être affrontés analytiquement et les systèmes pour lesquels on possède des résultats exacts, pour intéressants qu'ils soient, restent marginaux en nombre et relativement peu pertinents du point de vue expérimental,
- on est par ailleurs 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 les rend non contrôlées et peu fiables. Dans ce contexte, il est apparu indispensable de pouvoir disposer de méthodes nouvelles non biaisées et parfaitement contrôlées. Les méthodes numériques se sont récemment imposées comme

14. J. E. Hoffman *et al.*, Science **295**, 466 (2002).

15. M. Vershinin *et al.*, Science **303**, 1995 (2004).

16. T. Hanaguri *et al.*, Nature **403**, 1001 (2004).

des méthodes puissantes et efficaces pour aborder le problème des corrélations électroniques en matière condensée. Au cours des 15 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, pour laquelle il est internationalement reconnu. 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, Oak Ridge NL, LPTL Jussieu, Univ. Stanford & SLAC, etc.).

Le développement de nouvelles techniques algorithmiques permettra de simuler avec une plus grande précision tous les modèles de la matière condensée. Or, il s'agit d'une activité très peu représentée en France en dehors de notre groupe. Ce dernier s'est investi dans la mise en œuvre de plusieurs techniques pour certaines déjà éprouvées mais s'est aussi tourné activement vers le développement de techniques prometteuses :

1. Diagonalisations exactes – Algorithme de Lanczos
2. Bases réduites non-orthogonales – Calculs variationnels RVB (diagonalisation exacte de la projection du hamiltonien dans la base réduite des états RVB à courte portée)
3. Groupe de Renormalisation par la Matrice Densité (DMRG)
En collaboration avec Steve WHITE (UC Irvine), Guillaume ROUX utilise cet algorithme pour simuler des échelles de spins dopées.
4. Monte Carlo Quantique
 - 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 « déterminant » 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 [25].
5. Construction d'hamiltoniens effectifs : méthode CORE
En l'absence de méthode systématique permettant de dériver efficacement des modèles effectifs de basse énergie pour des dimensions $D \geq 2$, une nouvelle méthode appelée CORE (*CO*ntractor *RE*-normalisation) a été proposée récemment¹⁷ et semble prometteuse pour construire des hamiltoniens effectifs de systèmes magnétiques isolants¹⁸[24] ou dopés¹⁹ [23,9], à partir de la décomposition du réseau en cellules élémentaires.
6. Projet ALPS
Fabien ALET est impliqué dans un projet international de physique numérique appelé ALPS (*Algorithms and Libraries for Physics Simulation*) dont le but est de fournir, en libre accès, des programmes de simulations de systèmes de la matière condensée. Pour plus d'informations, voir le site <http://alps.comp-phys.org>.

Perspectives : information quantique et DMRG

Récemment, un échange fructueux s'est établi entre le domaine de l'information quantique et les simulations numériques en matière condensée. D'une part, les quantités mesurant l'intrication apparaissent pour le physicien du solide comme de nouvelles fonctions de corrélations et peuvent être sensibles à certaines transitions de phases. D'autre part, des avancées algorithmiques concrètes ont été proposées afin d'améliorer les performances du DMRG : il est ainsi possible de simuler maintenant efficacement des systèmes ayant des conditions aux bords périodiques. Dans un futur proche, il devrait être possible de calculer lors d'une seule simulation, la moyenne sur plusieurs réalisations du désordre ! Mentionnons également que la présence dans notre Laboratoire d'un groupe d'Information Quantique est un atout dans cette perspective.

17. C. J. Morningstar et M. Weinstein, Phys. Rev. D **54** 4131 (1996).

18. E. Berg, E. Altman et A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **90**, 147 204 (2003); R. Budnik et A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **93**, 187205 (2004).

19. E. Altman et A. Auerbach, Phys. Rev. B **65**, 104 508 (2002).

5. Discussion des perspectives relatives à de futures demandes de post-docs

Le groupe FFC souffre cruellement du manque de post-docs comparativement au cas d'autres groupes de très haut niveau, en Suisse ou aux USA par exemple. Si un(des) financement(s) pouvait(ent) être obtenu(s) (ANR, CNRS, Ministère, ...), nous envisageons une interaction de ce(s) post-doc(s) avec l'ensemble de l'équipe sur les perspectives développées précédemment. Il est tout à fait concevable que la répartition de leur temps de travail puisse se faire dans les proportions de 50% sur des projets déjà « balisés » dans l'équipe (plateaux d'aimantation, modèles frustrés, extensions de la méthode CORE, échelles de spins, phases inhomogènes dans les supraconducteurs, ...) et 50% sur des aspects plus prospectifs que nous désirons mettre en avant:

- DMRG et information quantique,
- modèles de dimères quantiques et dégénérescence topologique, effet du dopage.
- atomes ultra-froids sur réseaux

2.2 Physique statistique des systèmes complexes

Équipe (permanents):

- P.-H. Chavanis (CR1 CNRS)
- D. S. Dean (PR UPS)
- N. Destainville (MCF UPS)
- S. N. Majumdar (DR2 CNRS, muté au LPTMS Orsay au 1/2/2004, dont l'activité n'est pas présentée dans ce rapport, mais dont les publications réalisées durant sa présence au LPT ont été comptabilisées)
- M. Manghi (MCF UPS, recruté au 1/2/2005)
- C. Sire (promu DR2 CNRS au 1/10/2005)

Le groupe de physique statistique s'intéresse en priorité à la physique hors d'équilibre et aux systèmes désordonnés, dans des domaines aussi variés que les milieux granulaires, la biophysique, les quasi-cristaux, les liquides chargés ou les systèmes autogravitants.

2.2.1 Effets électrostatiques en matière molle

Chercheur: D.S. Dean

Le formalisme mathématique développé par David Dean avec Ron Horgan pour étudier les films de savon est basé sur l'observation que la théorie des champs du type Sine-Gordon peut être vue comme un champ à deux dimensions qui se propage dans une coordonnée temporelle correspondant à la direction perpendiculaire au film. Le système est décrit par une équation de Schrödinger fonctionnelle et les propriétés thermodynamiques peuvent être liées à la matrice de diffusion pour le propagateur fonctionnel du système. Ce formalisme leur a permis de retrouver une preuve alternative du « contact value theorem » reliant la pression du film à la charge de surface et la densité ionique à la surface dans le cas d'une charge de surface constante et uniforme [71]. Il a également permis de trouver les généralisations du « contact value theorem » dans le cas d'une discontinuité diélectrique entre le film et l'extérieur du film. Cette approche de théorie des champs a aussi été utilisée pour calculer la tension de surface des solutions ioniques [73]. Ils ont pu démontrer que le célèbre résultat de Onsager et Samaras sur la tension de surface pour les solutions diluées est le premier terme dans un développement en $g = l_B/l_D$ où l_B est la longueur de Bjerrum et l_D est la longueur de Debye. Ils ont trouvé les corrections au calcul de Onsager et Samaras dans la limite où $\Delta = (\epsilon - \epsilon_0)/(\epsilon + \epsilon_0)$ n'est pas égal à un.

Il y a plusieurs années, la force ou pression de disjonction entre deux milieux séparés par un milieu qui contient un électrolyte tel que de l'eau avec du sel a été calculée dans le cadre de la théorie de Debye-Hückel. Une force attractive du type Yukawa a été trouvée. Ils ont calculé le terme suivant à deux boucles [75] ou au prochain ordre en g , pour voir si cette force reste attractive. Il s'agit du premier premier calcul à deux boucles et ont été démontrés plusieurs points très intéressants. La force induite à deux boucles donne bien une attraction supplémentaire, et pas répulsive, donc l'image physique d'une force attractive reste inchangé. Cependant pour les systèmes de très grande taille, c'est la force induite par la correction à deux boucles qui domine et la forme fonctionnelle de la force d'attraction est renormalisée de sa valeur à une boucle $-C \exp(-2mL)/L$ à $-C' \exp(-2mL)/L^\alpha$, où L (qui est ici grand) est l'épaisseur de la couche d'électrolyte, m la masse de Debye, et α est une exposant renormalisé $\alpha = 1 - g/4$. Il est aussi intéressant

de remarquer que le calcul de la pression d'un gaz de Coulomb électroneutre à deux boucles doit être rendue fini en introduisant un « cut-off » microscopique qui correspond à un cœur dur entre les ions. Dans ce calcul de la pression de disjonction ils ont montré que ce cut-off peut être pris comme zéro et le résultat reste fini.

Dans les cellules musculaires il existe des tubules, connus sous le nom t-tubules, qui forment un réseau à l'intérieur des cellules. Le Professeur C. Huang du Département de Physiologie de l'Université de Cambridge, nous a posé la question suivante: comment les tubules de bicouche de lipides peuvent être stabilisés? Les théories basées sur les modèles continus mécaniques des bicouches prévoient que l'énergie libre d'un tubule, par rapport à une membrane plate, est [79,80]

$$F_B = \frac{k_B T \kappa_b L}{R},$$

où L est la longueur de tubule et R son rayon. La théorie la plus répandue prévoit que, pour une membrane d'épaisseur δ , $\kappa_b \propto \delta^2$, et est positif. Il existe des théories basées sur la chiralité des lipides qui prévoient que la structure tubulaire est stabilisée par une organisation similaire aux cristaux liquides. Cependant, les bicouches de lipides dans les cellules ont des composantes très dispersées et variées. Il est très important de bien comprendre la stabilité de ces tubules, car dans la maladie de la dystrophie musculaire, ces tubules deviennent instables et gonflés. Nous avons suivi la piste suivante: la constante diélectrique d'une membrane est $\epsilon_M \approx 2\epsilon_0$ et celle de l'eau est $\epsilon_W \approx 80\epsilon_0$, ce qui induit donc une force de van der Waals, du type Casimir. Avec notre approche fonctionnelle de Schrödinger nous avons calculé l'énergie libre de Casimir F_C et nous avons trouvé pour de grands R

$$F_C = -\frac{k_B T \kappa_c L}{R},$$

où $\kappa_c = \Delta^2(3 \ln(\pi\delta/a) + 6 \ln 2 + 3\gamma - 4)/64 + O(\Delta^4)$. Les forces de van der Waals statiques ont donc une tendance à stabiliser les tubules contre les forces mécaniques. Cependant, quand on compare les valeurs numériques, cette force ne semble pas assez importante pour surmonter les forces mécaniques, sauf dans les membranes peu rigides. Il est possible qu'en prenant en compte les effets non-statiques, qui viennent des fréquences de Matsubara non-nulles, cet effet devienne plus important. Pour suivre cette piste, les informations sur les propriétés diélectriques à fréquences non-nulles sont nécessaires. Ceci est en cours de développement. La longueur a dans notre formule pour κ_c est un « cut-off » microscopique nécessaire pour régulariser F_C , correspondant à une échelle de taille des dipôles de l'eau. La physique est dominée par les échelles ultra-violettes de l'ordre d'échelle de ce « cut-off ». La présence de ce « cut-off » implique que l'effet d'une concentration faible d'électrolyte dans l'eau ne changerait pas beaucoup la force de Casimir. Les expériences ont en effet démontré que l'équilibre des tubules peu chargés n'est pas influencé par la concentration en sel.

2.2.2 Systèmes vitreux et désordonnés

Chercheur: D.S. Dean

Transition vitreuse

La nature de la phase vitreuse reste, depuis presque cent ans, un grand sujet de débat. La définition expérimentale est fixée par un consensus des expérimentateurs: quand la viscosité explose rapidement telle que le système n'évolue plus sur une échelle de temps de l'heure à la journée, on parle de transition vitreuse. Mais est-ce que cette transition est thermodynamique ou purement dynamique dans le sens que le temps de relaxation τ diverge mais sans singularité thermodynamique comme on voit dans certains modèles champ moyen des verres de spins? Une autre possibilité est que τ reste fini mais devient très grand par rapport au temps d'observation. Le bakerlite est un vieux plastique utilisé pour la fabrication des anciennes prises électriques. Au cours des années, il devient plus fragile et moins élastique. Il reste hors d'équilibre pendant des années et on observe le phénomène de vieillissement. Un « fit » des données expérimentales pour τ est connu sur le nom de loi de Vogel-Fulcher

$$\tau \sim \exp\left(\frac{1}{T - T_g}\right).$$

Une des théories, ou plutôt approximation, pour la dynamique des liquides surfondus est l'approximation de couplage de modes. Cette théorie beaucoup utilisée par les numériciens est cependant le fruit de

plusieurs approximations non contrôlées. Elle prévoit notamment une divergence de τ comme loi de puissance. Nous avons étudié la dynamique d'un système de particules de type Langevin en interaction avec un potentiel V [74]. Nous avons essayé de calculer la constante d'auto diffusion κ_e d'une particule typique. L'approche est basée sur l'étude perturbative de l'équation de Fokker-Planck pour le système avec un calcul utilisant le groupe de renormalisation dans l'espace de Fourier à une boucle. Nous avons trouvé que pour certains potentiels d'interaction V , la constante de diffusion s'annule pour une certaine température comme

$$\kappa_e \sim \exp\left(-\frac{1}{T - T_g}\right),$$

c'est-à-dire une loi compatible avec Vogel-Fulcher. Nous avons aussi pu identifier que la même approximation peut être utilisée pour calculer la thermodynamique. Nous avons ainsi trouvé que la transition correspond bien à une singularité thermodynamique (un pôle dans la fonction de structure).

D. Dean et ses étudiants de thèse, R. Cherrier et A. Lefèvre, ont étudié des modèles champ moyen avec matrices d'interaction J statistiquement invariantes sous les transformations de rotation [67]. Ils ont classifié les transitions vitreuses dans ces modèles selon la densité des valeurs propres du matrices J . Pendant ce travail, ils ont trouvé une façon de réaliser la moyenne sur le désordre avec la méthode des répliques, et donc de retrouver très simplement certains résultats de la théorie des matrices aléatoires. Grâce à cette technique, ils ont aussi pu calculer le nombre moyen d'états métastables dans certains de ces modèles [68].

Diffusion en milieu aléatoire

Les études de la diffusion dans un potentiel aléatoire utilise presque toujours les statistiques gaussiennes pour modéliser le potentiel. Dans les zéolites, et autres matériaux, le potentiel aléatoire est dû à la présence d'impuretés souvent chargées. On a donc

$$\phi(x) = \sum_i q_i V(x - x_i),$$

où l'impureté i au site x_i peut avoir une charge q_i et un potentiel effective V . A deux dimensions, et dans le cas où q_i prend la valeur ± 1 avec une probabilité $1/2$, D. Dean et ses collaborateurs ont trouvé une formule exacte [72] pour la constante de diffusion κ_e . Il est souvent supposé que dans la limite dense d'impuretés le champ ϕ peut être approximé par un champ gaussien. A partir de notre formule exacte nous avons vu que ceci n'est pas vrai à très basse température. Le théorème central limite stipule que le champ typique est gaussien. Cependant à basse température la diffusion explore les minima du potentiel qui font partie des statistiques extrêmes et le théorème central limite ne s'applique pas.

D. Dean a étudié le cas général de la diffusion dans un potentiel dû aux impuretés non-chargées à plusieurs dimensions avec une théorie de perturbation. La constante de diffusion peut être calculée avec un développement double dans la densité et la température. Nous avons identifié les diagrammes qui correspondent à l'approximation gaussienne, et qui nous permettent d'identifier le régime où cette approximation est valable dans le cadre général [76]. Ils ont également introduit une forme nouvelle du groupe de renormalisation pour ce problème, basée sur la décimation de la densité des impuretés. Cette approche s'avère très performante et est en bon accord avec les simulations numériques. Ils ont pu appliquer ces résultats au calcul de la constante diélectrique effective d'un milieu diélectrique contenant des sphères ayant autre constant diélectrique, un problème vieux de plus de cent ans. La formule approchée la plus utilisée pour ce problème, même aujourd'hui, est le célèbre résultat de Maxwell-Garnett (enseigné dans tout bon cours d'électromagnétisme). La nouvelle théorie est supérieure à la formule de Maxwell-Garnett quand les sphères rajoutées ont une constante diélectrique plus élevée que celle du milieu ambiant.

Optimisation

Le Problème du Voyageur de Commerce (Traveling Salesman Problem, TSP) possède une formulation élémentaire: étant données N villes, quel chemin doit-on emprunter pour toutes les visiter en minimisant la longueur totale du trajet? Ce problème d'optimisation appartient à la classe des problèmes dits NP, ce qui signifie qu'il n'existe pas d'algorithme fournissant le chemin optimal en temps polynômial. Ce paradoxe en fait un problème stimulant et fécond qui donne lieu à des stratégies heuristiques originales et à des applications au domaine en plein essor de la bio-informatique. Le problème inverse est de trouver le chemin qui maximise la longueur totale du trajet, ce problème est appelé le « Taxi Cab Rip Off » ou

l'arnaque du taxi pour des raisons évidentes. La longueur d'un chemin, notée σ est donnée par

$$L(\sigma) = \sum_i |x_{\sigma_{i+1}} - x_{\sigma_i}|$$

où x_{σ_i} est le point dans l'espace où se trouve la ville visitée au pas i du chemin. Si on définit un système physique par un espace des phases donné par tous les chemins σ possibles et où l'énergie d'un chemin est en $E(\sigma) = -L(\sigma)$, il est clair que l'énergie la plus basse de ce système correspond au chemin le plus long. Quand la température de ce système devient nulle, l'énergie interne du système correspond à moins la valeur du chemin optimal. En général on ne sait pas calculer la longueur optimale. Cependant on peut se poser la question de la valeur moyenne du chemin optimal par ville l ($l = L/N$) (quand le nombre de villes N est grand). Avec D. Lancaster et S. Majumdar [77,81], D. Dean a introduit une méthode qui répond à cette question pour plusieurs problèmes de ce type, et où on peut considérer plusieurs fonctions de distance entre les villes $d(x-y)$, le cas $d(x) = |x|$ étant la fonction de distance dans les espaces euclidiens. Cette méthode s'applique également en toute dimension. Ils ont notamment trouvé que, lorsque les villes sont distribuées uniformément dans un hypercube de volume 1, $l = 0.5$ à 1 dimension, $l = 0.765196\dots$ à 2 dimensions et $l = 0.960592\dots$ à 3 dimensions. En fait, ces résultats ont été établis en dimension quelconque. Le résultat pour la dimension deux est en accord avec un résultat rigoureux développé par les mathématiciens. Néanmoins, aucune preuve rigoureuse existe aujourd'hui pour les dimensions supérieures à deux. Ceci risque de changer car cette nouvelle méthode a la propriété remarquable de suggérer la façon de trouver le chemin optimal à partir des équations thermodynamiques à température nulle. Cette méthode est très puissante et s'applique à des problèmes où le désordre intervient sous la forme de points aléatoirement distribués dans l'espace. Elle trouvera certainement d'autres applications dans le domaine d'optimisation combinatoire. *Il est à noter que le preprint pour ce papier, sur le serveur cond-mat: <http://fr.arXiv.org>, a été choisi par le « Journal Club for Condensed Matter Physics ». Ceci est une sélection faite par les correspondants de C.M. Varma, pour faire remarquer les trois ou quatre papiers les plus intéressants de chaque mois. Chaque mois, il y entre 500 et 1000 papiers qui apparaissent sur le serveur cond-mat. Voir http://jc-cond-mat.bell-labs.com/march/march_2005.html.*

2.2.3 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 [83].

Lorsqu'on voit les pavages aléatoires comme des membranes dirigées, leur « codimension » est la différence entre la dimension de l'espace dans lequel vivent ces membranes et leur dimension propre. N. Destainville a étudié avec Mike Widom, Rémy Mosseri et Francis Bailly, les pavages de dimension deux mais dont la codimension devient grande [88,89]. Ils ont montré que les effets de bords typiques dans ces systèmes disparaissent dans cette limite. En effet, le gradient d'entropie entre le bord et le centre tend à disparaître à mesure que la codimension tend vers l'infini. Ils ont calculé une valeur numérique approchée de l'entropie dans cette limite, et une valeur « champ moyen ».

2.2.4 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. Après avoir étudié le cas des pavages bidimensionnels, il a exploré le cas beaucoup plus complexe des pavages de rhomboèdres en dimension 3, avec Vianney Desoutter en thèse sous sa direction. Du fait du caractère tridimensionnel des pavages, des structures locales apparaissent qui sont longues à casser et qui réduisent localement le nombre de degrés de liberté de flips (elles sont appelées « cycles »). Le système est alors susceptible de se trouver piégé dans des régions restreintes de l'espace de configurations. Il s'agit de déterminer si cela se traduit par une brisure de « connexité par flips » ou par l'existence de barrières entropiques susceptibles de ralentir la dynamique. Ils ont partiellement démontré une conjecture de Las Vergnas vieille de 25 ans en donnant un critère suffisant de connexité. Dans le cas d'intérêt physique de la symétrie icosaédrique, où se critère ne s'applique pas, ils ont mis en évidence une brisure d'ergodicité de la dynamique de flips. Ceci a des conséquences importantes, jusque-là ignorées, pour les simulations Monte Carlo utilisées intensivement dans le domaine. D'autre part, cela pourrait avoir des conséquences sur la dynamique de phasons dans les quasi-cristaux icosaédriques réels qu'il reste à explorer [87].

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

V. Desoutter et N. Destainville ont aussi 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 [85].

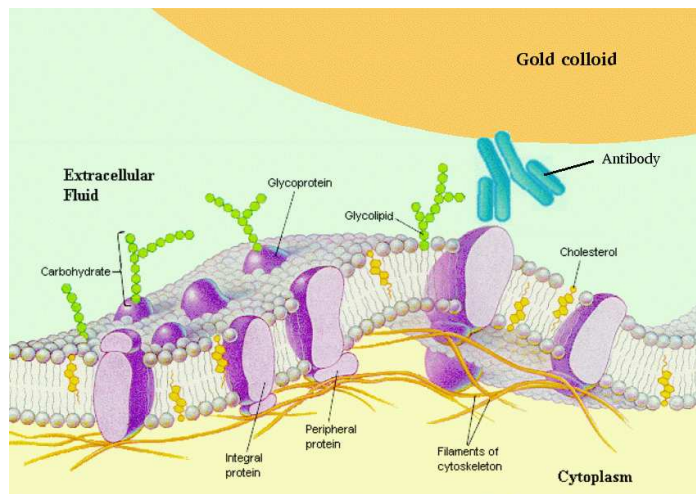


FIG. 2.6 —: Principe du suivi de molécule unique dans le cas d'une protéine membranaire. Le colloïde d'or (en jaune) est fixé à la protéine (en violette) par l'intermédiaire d'un anticorps spécifique (en bleu). C'est en suivant en microscopie optique le mouvement du colloïde que l'on retrace la trajectoire de la protéine. Sur ce schéma, on a aussi représenté le cytosquelette de la cellule au voisinage de la membrane. Il est susceptible d'affecter le mouvement des protéines intégrales par purs effets stériques.

2.2.5 Physique statistique et biologie

Chercheurs: D.S. Dean, N. Destainville et M. Manghi (depuis février 2005)

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-vidéo-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. 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 [82,??].

Comme ce point de vue original a suscité certaines controverses dans la communauté des biologistes cellulaires, N. Destainville travaille actuellement à conforter ce modèle. Il a tout récemment développé avec Laurence Salomé un algorithme de détection des sauts dans les trajectoires expérimentales obtenues par suivi de particule unique [90]. En effet, des sauts entre domaines de confinement sont prédits par le modèle « concurrent » de barrières. Ils ont montré que leur algorithme les détecte avec une bonne fiabilité. Ils ont observé sur les trajectoires expérimentales qu'il en détecte bien moins que ce que prévoirait le modèle de barrières, ce qui renforce leurs précédentes conclusions.

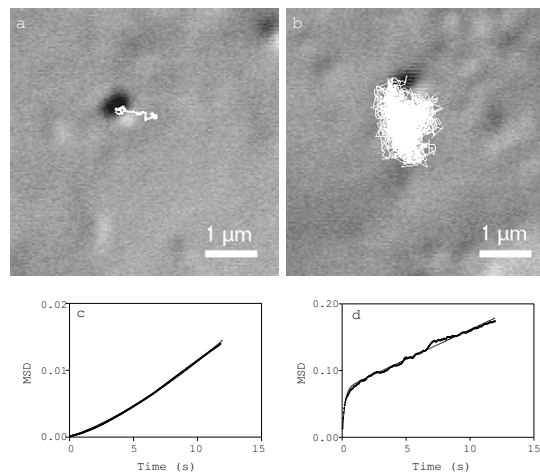


FIG. 2.7 – Exemples typiques de trajectoires obtenues par suivi de particule unique sur une cellule vivante (le fond gris). En haut : Trajectoires de 2 minutes acquises à cadence vidéo. Deux types de mouvements sont observés : diffusion dirigée (a) et diffusion confinée dans un domaine qui lui-même diffuse lentement. En bas : déplacement quadratique moyen pour chaque trajectoire, en fonction du temps, et ajustement théorique. Dans le second cas (d), on a bien une diffusion rapide à temps courts et une diffusion lente à temps longs. Nous interprétons cette dernière comme la diffusion d'une assemblée de protéines à laquelle appartient la protéine suivie.

Enfin, N. Destainville et L. Salomé ont exploré un point de méthodologie concernant la technique de suivi de particule unique, lequel se fait généralement à cadence vidéo, *i.e.* avec une période d'acquisition de 40 ms. Dans quelles mesures est-on alors capable de « voir » des phénomènes dont les échelles de temps sont de cet ordre de grandeur, voire inférieures ? L'effet de moyenne induit est susceptible d'affecter les observables physiques mesurées. Leur travail a eu pour objet de quantifier cet effet, de vérifier qu'il est négligeable dans les trajectoires de la référence [82], et de montrer que l'on peut très simplement le corriger quand il existe. Ces résultats s'adressent à toute la communauté du suivi de particules uniques [91].

2.2.6 Propulsion par une flagelle élastique en rotation

Chercheur: M. Manghi

En collaboration avec R.R. Netz (Technische Universität München), M. Manghi a étudié les mécanismes élastiques et hydrodynamiques qui induisent la propulsion d'objets de taille micrométrique dans un liquide visqueux. Cette étude s'inspire du mode de propulsion de bactéries telles que l'*Escherichia Coli* ou la *Rhodobacter Sphaeroides* qui se fait grâce à des flagelles rigides et hélicoïdales mises en rotation par des moteurs moléculaires insérés dans la membrane cellulaire. À l'aide de simulations numériques de dynamique Brownienne, M. Manghi s'est intéressé au couplage entre les interactions hydrodynamiques (à

cette échelle la dissipation visqueuse domine les effets inertiels), l'élasticité et la courbure de la flagelle. La flagelle est modélisée par une chaîne de sphères reliées élastiquement, le fluide visqueux est traité à l'aide du tenseur de Rotne-Prager et la dynamique de chaque sphère est régie par une équation de Langevin qui intègrent le couplage entre toutes les forces thermiques (mouvement brownien), élastiques et hydrodynamiques [92].

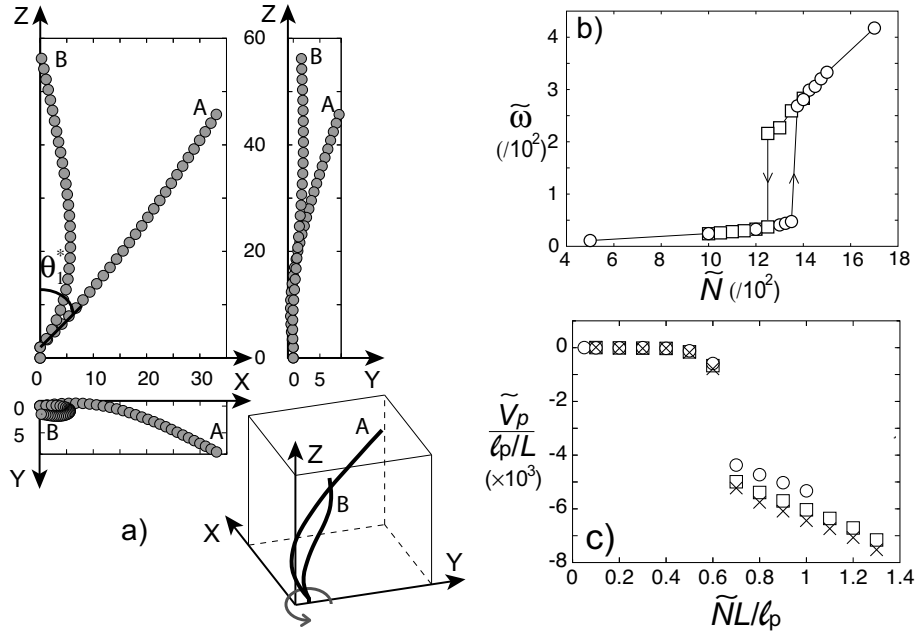


FIG. 2.8 –: a) Schéma et vues projetées du filament en rotation avant (A) et après (B) la bifurcation pour $\ell_p/L = 10^3$. b) Vitesse de rotation en fonction du couple appliqué en l'augmentant (o) et le diminuant (□) progressivement pour $\ell_p/L = 1.7 \times 10^3$. c) Vitesse de propulsion parallèlement à l'axe de rotation en fonction de N/N_c pour différentes valeurs de ℓ_p/L . Les vitesses et couples sont ici sans dimension.

Bifurcation dynamique élastique

En appliquant un couple constant, N , à la base de flagelle (qui simule le couple appliqué par le moteur trans-membranaire dans le cas des bactéries comme l'*E. Coli*), celle-ci tourne et se déforme sous l'action du frottement hydrodynamique. Pour un couple critique, N_c , une bifurcation apparaît, la flagelle passant d'un état où elle est droite telle une tige vers un état où elle s'enroule autour de l'axe de rotation comme le montre la Fig. 2.8. Une hystérèse prononcée apparaît lorsque que N décrit toute la région critique. Il a été vérifié que cette bifurcation sur-critique est uniquement d'origine élastique, le couple critique suivant la loi $N_c \simeq \ell_p/L$ où ℓ_p et L sont respectivement la longueur de persistance et la taille du filament. Cette bifurcation élastique n'avait jamais été étudiée auparavant et semble être importante car son seuil est bien plus petit que celui de la bifurcation sous-critique dite de « twirling-whirling » des tiges rotatives avec élasticité de torsion.

Propulsion pour des couples supérieurs à N_c

Bien que cette bifurcation ne soit pas associée à une brisure de symétrie, la propulsion induite par la géométrie hélicoïdale est bien plus importante: la vitesse de translation dans la direction de l'axe de rotation, V_p , décrit un saut discontinu à N_c (cf. Fig. 2.8). C'est le couplage entre la nouvelle géométrie et les interactions hydrodynamiques qui est responsable de cette propulsion, un peu à la manière d'un tire-bouchon qui se translate lorsqu'il est vissé dans le liège. Une analyse complète des mobilités de la flagelle et de son rendement en fonction du couple et de la force de friction appliqués a été faite. En particulier, quelque soit le signe de N , la vitesse est toujours propulsive. Cette propriété peut être utile dans une perspective de fabrication de micro-propulseurs pour des applications bio-médicales.

Un micro-propulseur élastique constitué d'une flagelle greffée à un corps en forme de croix a été simulé avec des techniques identiques. En particulier, les vitesses de rotation de la flagelle et du corps (qui sont de

signe opposé) et la vitesse de translation V_p diminuent lorsque la taille caractéristique du corps augmente. Les trajectoires de ce micro-propulseur sont hélicoïdales, le pas et le rayon de l'hélice varient avec la géométrie et N . Pour des filaments flexibles, $\ell_p \sim L$, les fluctuations thermiques deviennent importantes et la mémoire de la direction de l'axe de l'hélice est perdue après un certain temps de persistance.

Ce mécanisme élasto-hydrodynamique pourrait être étudié expérimentalement à l'aide d'un modèle d'échelle macroscopique et joue certainement un rôle chez certaines bactéries qui génèrent des couples suffisamment importants pour observer ces phénomènes non-linéaires. Avec les valeurs adéquates, cette étude théorique conduit aux ordres de grandeur des vitesses de propulsion observées expérimentalement ($V_p \simeq 30 \mu\text{m/s}$).

2.2.7 Exposant de corrélation temporelle des systèmes conservés

Chercheur: C. Sire

Prenons l'exemple d'un système magnétique décrit par un modèle d'Ising qui présente une transition ferromagnétique sous une certaine température T_c . Le système étant préparé dans un état de haute température, on le refroidit brutalement sous T_c . Des domaines des deux phases de spin (\uparrow et \downarrow) croissent alors sur une échelle $L(t) \sim t^{1/2}$ (voir Fig. 2.9). Ce genre d'évolution est décrit par le terme générique anglais de « coarsening ». Le fait le plus remarquable est que les fonctions de corrélation des spins ne dépendent alors que de la distance exprimée en unité $L(t)$, et non plus explicitement du temps : $\langle s(\mathbf{x},t)s(0,t) \rangle = g(x/L(t))$, où la fonction g devient universelle à grand temps. Physiquement, cette propriété traduit le fait qu'après un changement d'échelle par un facteur $L(t)$, différentes images du système prises à des temps successifs seront statistiquement identiques.

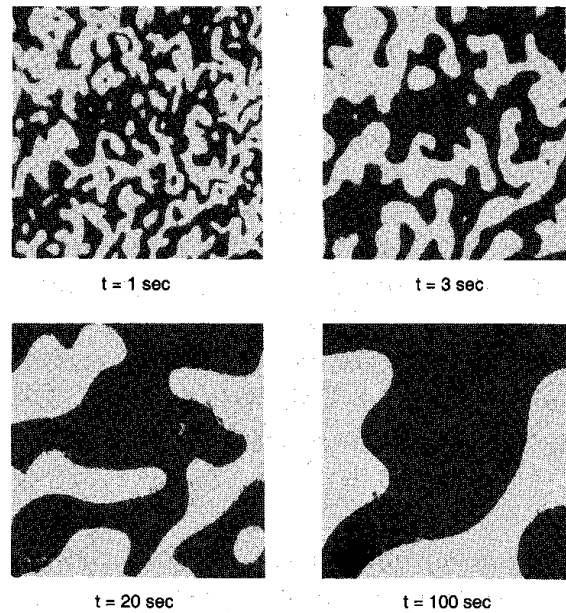


FIG. 2.9 –: Quatre stades de l'évolution d'hélices de cristaux liquides nématiques visualisés en lumière polarisée, ce qui permet de différencier les deux sens possibles de rotation des hélices [34]. Ce système est dans la classe d'universalité du modèle d'Ising 2D. La croissance de l'échelle typique 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'autocorrélation temporelle mesuré est $\lambda_{\text{exp}} \approx 1.25$, à comparer avec la valeur théorique $\lambda_{\text{th}} = 1.286 \dots$

De plus, les corrélations temporelles sont importantes et permettent d'introduire un nouvel exposant universel λ (mesuré dans divers systèmes expérimentaux), défini par $\langle s(\mathbf{x},t)s(\mathbf{x},0) \rangle \sim [L(0)/L(t)]^\lambda$, et que C. Sire et S.N. Majumdar ont calculé dans le cas non conservé, il y a quelques années de cela.

Dans de nombreux systèmes physique, le paramètre d'ordre est *localement* conservé. Par exemple, dans le cadre de la séparation de deux phases A et B (l'huile et le vinaigre dans la vinaigrette...), on peut définir une variable de spin qui vaut $s(\mathbf{x},t) = +1$ dans les régions riches en phase A et $s(\mathbf{x},t) = -1$ dans les régions riches en phase B . La tension de surface génère alors une interaction effective ferromagnétique

entre spins (cela coûte de l'énergie de mettre les deux phases en contact). Cependant, contrairement au modèle d'Ising habituel, il est hors de question, par exemple dans le cadre d'une simulation Monte Carlo, de retourner spontanément un spin local : le vinaigre ne peut se transformer en huile ! La dynamique procède donc par échange des valeurs de spins entre sites voisins (dynamique de Kawasaki), conduisant à la diffusion de la matière et éventuellement à l'accrétion de spins d'une phase donnée sur des bulles déjà formées de cette phase.

On peut donc définir des modèles de spins conservés, dont les propriétés à l'équilibre (T_c , exposants critiques...) sont strictement identiques au modèle de spins non conservé correspondant, mais dont les propriétés dynamiques s'en démarquent totalement. Ainsi, strictement sous T_c , l'échelle des domaines $L(t)$ croît comme $L(t) \sim t^{1/3}$ pour un paramètre d'ordre scalaire, et $L(t) \sim t^{1/4}$ pour un paramètre d'ordre vectoriel. Ces lois sont logiquement plus lentes que $L(t) \sim t^{1/2}$ obtenu dans le cas non conservé. Pour un refroidissement critique à T_c exactement, $L(t) \sim t^{1/z}$ avec $z = 4 - \eta$, où η est l'exposant critique usuel caractérisant la décroissance des corrélations spatiales au point critique. Au contraire, pour les systèmes non conservés, z est un nouvel exposant critique, indépendant des exposants critiques statiques.

Lorsque l'on refroidit un tel système conservé à T_c ou sous T_c , il est bien établi que l'autocorrélation se comporte pour $t \gg t'$ comme $A(t, t') = \langle s(\mathbf{x}, t)s(\mathbf{x}, t') \rangle \sim L(t)^{-\lambda}$, avec $\lambda = d$, la dimension de l'espace. Or de nombreux auteurs ont observé un premier régime où l'autocorrélation décroît avec un exposant $\lambda' > d$, ce régime étant d'autant plus long que le temps de référence t' est grand (voir Fig. 2.10). λ' est un nouvel exposant critique dynamique des systèmes de spins conservés dont l'interprétation (sans parler du calcul) demeurerait mystérieuse.

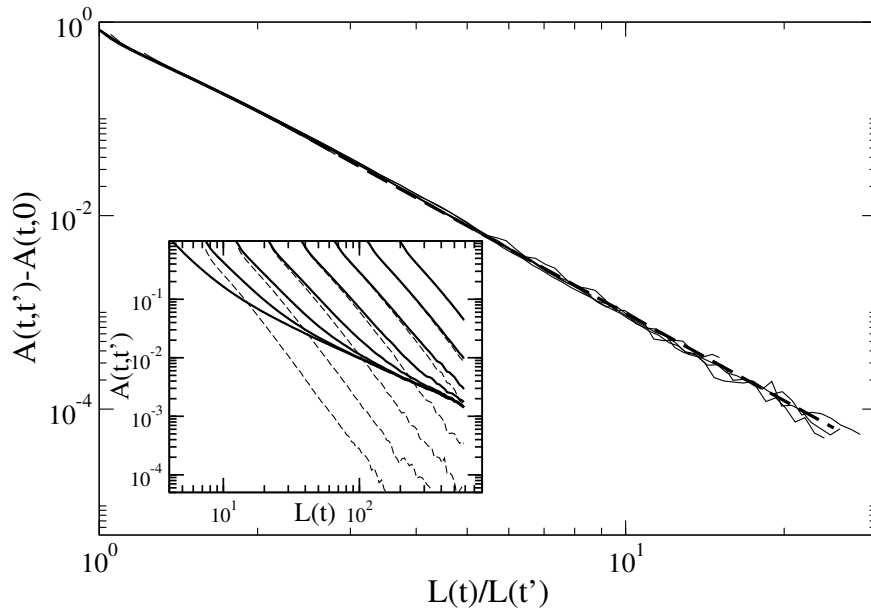


FIG. 2.10 — L'encart montre l'autocorrélation $A(t, t')$ en fonction de $L(t)$ pour divers temps de référence t' (traits pleins). Si on observe bien un régime asymptotique avec $\lambda = d$ (ici $d = 1$), ce régime est précédé par un autre, universel, où l'autocorrélation décroît plus rapidement avec un exposant $\lambda' = d + 2$ (ici $\lambda' = 3$), qui s'étend jusqu'à ce que $L(t) \sim L(t')^\phi$ (ici $\phi = 3/2$). Lorsque l'on soustrait l'autocorrélation avec la condition initiale, $A(t, t') - A(t, 0)$ ne présente plus que ce second régime universel (figure principale où la relation d'échelle décrite dans le texte est illustrée et courbes en pointillés de l'encart).

En résolvant exactement la dynamique conservée de spins vectoriels de dimension n dans la limite $n \rightarrow +\infty$ après un refroidissement à T_c , C. Sire a pu montrer que [94]

$$A(t, t') = \langle s(\mathbf{x}, t)s(\mathbf{x}, t') \rangle = A(t, 0) + L(t')^{-(d-2+n)} f[L(t)/L(t')],$$

où $f(x) \sim x^{-\lambda'}$ à grand x est une fonction universelle, avec $\lambda' = d + 2$. Le second terme domine le premier pour des temps t tels que $L(t') < L(t) < L(t')^\phi$, et où $\phi = 2 - \eta/2$. Pour des temps très grands ($L(t) \gg L(t')^\phi$), l'autocorrélation avec la condition initiale domine. A noter que $A(t, 0) \sim s_0^2 L(t)^{-d}$ où s_0^2 est un nombre non universel mesurant les fluctuations dans la condition initiale. Ces résultats restent en

fait vrais pour toutes les dimensions n du paramètre d'ordre et d'espace d . De plus, l'argument permet d'étendre le résultat à une trempe strictement sous T_c . Dans ce cas, on trouve $\lambda' = d + 4$ et $\phi = 1 + d/4$. De plus, cette analyse permet de démontrer que le facteur de structure $S(k)$ (transformée de Fourier de la fonction de corrélation spatiale), se comporte comme $S(k) \sim k^2$ à T_c et $S(k) \sim k^4$ sous T_c [94, et en préparation]. L'interprétation physique de ces deux régimes conduit à identifier la longueur de cross-over $L(t)^\phi$ comme une longueur de diffusion thermique. Ces résultats sont confirmés par des simulations en $d = 1$ (voir Fig. 2.10) et $d = 2$, et illustrés par une expérience récente dans des cristaux liquides par T. Nagaya et J.-M. Gilli (Phys. Rev. Lett. (2004)).

2.2.8 Mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée

Chercheur: P.-H. Chavanis

La mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée est actuellement un domaine en plein essor. Les systèmes avec des interactions à longue portée, en particulier dans le cas attractif, ont la propriété remarquable de s'organiser spontanément en structures cohérentes. Ce sont les galaxies en astrophysique, les jets ou les tourbillons géants (comme la tache rouge de Jupiter) dans les écoulements planétaires, les populations de bactéries dans le cas de la chimiotactie, la formation de barres dans les galaxies spirales, la formation des planètes dans le cas de la nébuleuse solaire ou les agrégats de particules dans des modèles jouets comme le modèle HMF. Il est important de développer un outil de mécanique statistique approprié pour rendre compte de la forme et de la stabilité de ces « structures cohérentes ». Au vue de la diversité des applications, c'est une thématique essentiellement transversale qui connecte différents domaines de la physique. En plus de ces applications, la mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée pose des problèmes de principe comme l'inéquivalence des ensembles statistiques, l'existence de chaleurs spécifiques négatives dans l'ensemble microcanonique, la lente relaxation collisionnelle vers l'état de Gibbs, la formation de structures de quasi-équilibre avec des statistiques non-boltzmanniennes, et la très longue durée de vie d'états métastables se comportant comme e^N où N est le nombre de particules. Le travail de P.H. Chavanis et C. Sire concerne le développement de méthodes de mécanique statistique pour aborder les systèmes avec des interactions à longue portée et la description des analogies (et des différences) entre ces différents systèmes.

Turbulence 2D et mécanique statistique des tourbillons

P.-H. Chavanis et J. Sommeria (2002) 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. 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 leurs 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).

A cause d'effets non idéaux 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 nonlinéaire 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 généralisées. En exploitant cette *analogie thermodynamique*, P.H. Chavanis [98,109,228] 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.

Mécanique statistique des systèmes auto-gravitants

La mécanique statistique des systèmes auto-gravitants est subtile car, en toute rigueur, il n'existe pas d'état d'équilibre statistique à cause de l'évaporation des étoiles rapides. Même si l'on considère des systèmes confinés (artificiellement dans une « boîte » ou par des potentiels de marée) il n'existe pas d'équilibre statistique à cause du phénomène de « catastrophe gravothermale » qui est un type d'effondrement gravitationnel. Cependant, pour des énergies suffisamment grandes (supérieures à la limite d'Antonov) le système peut se trouver dans un état métastable avec une durée de vie considérable augmentant comme e^N [110] où $N \sim 10^6$ est le nombre d'étoiles typique dans un amas globulaires. C'est donc en ce sens là que la notion d'équilibre statistique pour de tels systèmes existe. Cependant, au dessous de l'énergie d'Antonov, la phase métastable disparaît et le système s'effondre sur lui-même.

Dans le cadre de l'interaction gravitationnelle, P.H. Chavanis [97] 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 maximisation de l'entropie de Tsallis fournit soit une condition de thermodynamique généralisée pour un gaz de particules de Langevin auto-gravitantes soit une condition de stabilité dynamique nonlinéaire pour les équations de Vlasov-Poisson ou les équations d'Euler-Poisson [100]. Il se trouve en effet que le critère de stabilité dynamique nonlinéaire est *similaire* à un critère de stabilité thermodynamique généralisée [98,113].

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 par P.H. Chavanis en 2002 de manière numérique et analytique et poursuivie plus récemment [99,107,110]. 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 zéro (catastrophe gravothermale et collapse isotherme), des chaleurs spécifiques négatives en microcanonique, des phénomènes d'hystérèse (collapse/explosion) etc. Le diagramme de phase complet du gaz auto-gravitant régularisé a été obtenu dans [99,107,110]. 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 » [99].

Chavanis & Rieutord [99] ont considéré la mécanique statistique des systèmes auto-gravitants fermioniques 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 l'effondrement isotherme est décalé vers des températures plus basses (i.e., il arrive plus tard). Le cas d'une rotation quelconque a été étudiée numériquement dans [99] 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 où 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.

Enfin, P.H. Chavanis [107] a étudié l'effet de la dimension d'espace sur la stabilité du gaz de fermions auto-gravitants. En dimension $d \geq 4$ la mécanique quantique (principe de Pauli) n'est plus capable de stabiliser le système contre l'effondrement gravitationnel. Autrement dit, les « naines blanches » qui sont en équilibre pression quantique/gravité en $d = 3$ seraient instables en $d = 4$. Comme la dimension $d = 2$ est également critique pour la gravité [100] cela implique que la dimension $d = 3$ de notre univers est très spéciale. Noter que l'étude de l'influence de la dimension de l'espace sur les lois de la nature est un problème récurrent en physique qui a été considéré en particulier par Ehrenfest en 1917.

Formation des barres dans les galaxies spirales et modèle HMF

Pour mieux comprendre la mécanique statistique des systèmes avec des interactions à longue portée, un modèle jouet d'interactions à longue portée, appelé le modèle HMF (Hamiltonian Mean Field) est étudié par plusieurs groupes car il reproduit les phénomènes complexes générés par des systèmes plus réalistes tout en permettant une étude quasi-analytique de ces phénomènes. Le modèle HMF consiste en un ensemble de N particules évoluant sur un cercle et interagissant toutes entre elles via un potentiel $\sim \cos(\theta_i - \theta_j)$. C'est donc un modèle 1D de particules Hamiltoniennes avec une interaction à longue portée réduite à un seul mode de Fourier.

P.H. Chavanis *et al.* [114] ont étudié ce modèle HMF en soulignant les analogies (et les différences) avec les systèmes auto-gravitants et en adaptant les méthodes développées en astrophysique dans le cadre de ce modèle simplifié. En particulier, ce modèle présente une transition de phase du deuxième ordre en dessous d'une énergie critique faisant passer le système d'un état spatialement homogène à un état fortement inhomogène (cluster). Cette transition a des analogies avec l'instabilité de Jeans en astrophysique. De plus, nous avons montré que le modèle HMF était équivalent à un modèle introduit en astrophysique pour rendre compte de la formation de barres dans les galaxies spirales. Dans cette analogie, les barres sont l'équivalent des « clusters ». P.H. Chavanis a également introduit un nouveau modèle, appelé modèle BMF (Brownian Mean Field) qui consiste en N particules Browniennes sur un cercle interagissant via un potentiel $\sim \cos(\theta_i - \theta_j)$. C'est la version canonique du modèle HMF microcanonique. Ces résultats ont ensuite été étendus au cas de potentiels d'interaction à longue portée plus généraux [116,117] en soulignant la distinction entre une dynamique hamiltonienne (microcanonique) et Brownienne (canonique).

Particules Browniennes auto-gravitantes et agrégation chimiotactique des colonies de bactéries

Dans une série d'articles [100,93,103,105,106,115], P.H. Chavanis et C. Sire ont étudié un modèle de particules Browniennes auto-gravitantes qui est la version canonique du modèle Hamiltonien microcanonique de particules Newtoniennes étudié en dynamique stellaire. Ils ont montré que les équations du problème décrivaient également l'agrégation chimiotactique de particules biologiques sécrétant une substance (odeur, nourriture, phéromone,...) ayant un effet « attractif » à longue portée sur toute la colonie. Cette thématique sera développée en Sec. 2.2.10.

2.2.9 Distributions non-Boltzmanniennes

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

Récemment, plusieurs chercheurs ont remis en cause l'universalité de la distribution de Boltzmann en physique. Ce problème remonte à Einstein lui-même qui n'acceptait pas le principe de Boltzmann $S = k \ln W$ comme un principe général car d'après lui (Einstein) la statistique d'un système (W) devait dépendre de la dynamique et ne pouvait avoir une expression générale. En 1988, Tsallis a jeté un pavé dans la mare en introduisant une forme généralisée d'entropie dans le but de décrire des systèmes complexes. Ce fut le point de départ de plusieurs généralisations de la thermodynamique, de la mécanique statistique et des théories cinétiques. De nombreuses études expérimentales et numériques (dans un nombre impressionnant de domaines de la physique) ont montré que les systèmes complexes exhibaient des distributions non-standard (non Boltzmanniennes) et que, dans un certain nombre de cas, elles pouvaient être fittées par les q -distributions de Tsallis. Cependant, il existe des cas qui ne correspondent ni à la distribution de Boltzmann ni à celle de Tsallis [118].

Ces résultats ont suscité une vive réaction (parfois même violente) dans la communauté de la mécanique statistique avec les partisans et les adversaires de ces approches de « thermodynamique généralisée ». Le point qu'il est important de comprendre est l'origine physique de ces distributions non-standard [113]. Il faut réaliser que ces distributions non-Boltzmanniennes peuvent se manifester pour des raisons très différentes et qu'il n'y a pas d'explication unique et universelle. On ne peut pas se « contenter » d'invoquer l'entropie de Tsallis (sans autre justification) dès que le système est compliqué (non-extensif, longue portée, non-Markovien,...).

Ce domaine est très vaste et en plein essor. Il n'est pas encore possible de dresser un panorama général et définitif du sujet mais différentes directions de recherche commencent à se dégager.

Équations cinétiques généralisées

Pour comprendre les spécificités de l'entropie de Tsallis, P.H. Chavanis [98,101,102,104,108] s'est intéressé à la structure mathématique des équations cinétiques. La conclusion obtenue est que, de ce point de vue, l'entropie de Tsallis est une entropie généralisée *particulière* parmi une infinité d'autres formes possibles $S = - \int C(f) d\mathbf{r} d\mathbf{v}$ où C est une fonction convexe quelconque (l'entropie de Tsallis correspond à $C(f) = (f^q - f)/(q - 1)$ et elle se réduit à l'entropie de Boltzmann $C(f) = f \ln f$ pour $q \rightarrow 1$). En effet, il est possible de généraliser les équations de Fokker-Planck (Kramers, Smoluchowski,...) et les équations cinétiques (Boltzmann, Landau,...) de manière à ce qu'elles fassent croître n'importe quelle fonctionnelle de la forme précédente. Les solutions stationnaires de ces équations maximisent l'entropie (ou minimisent l'énergie libre) généralisée en tenant compte des lois de conservation habituelles. Cela conduit à une notion de thermodynamique généralisée, au moins dans un sens effectif.

Cette notion de « thermodynamique généralisée » peut avoir un grand nombre d'applications dans différents domaines de la physique, hydrodynamique, astrophysique, biologie,... avec des interprétations différentes. Cette approche est encore en développement et les cadres de ses applications sont encore mal définis. Disons que d'un point de vue formel ces équations interviennent lorsque les coefficients de diffusion, de friction ou de mobilité dans les équations de Fokker-Planck dépendent de la concentration (une situation fréquente en biologie) ou lorsque les probabilités de transition dans le cas des équations cinétiques ont une forme plus complexe que celle considérée habituellement.

Cette approche est également intéressante du point de vue mathématique car elle conduit à une nouvelle classe d'équations cinétiques qui englobe dans un cadre général celles qui sont bien connues. Partant d'une équation de Kramers généralisée

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} - \nabla \Phi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left\{ D \left[f C''(f) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} + \beta f \mathbf{v} \right] \right\}, \quad (2.1)$$

Chavanis *et al.* [102] ont obtenu par une analyse de Chapman-Enskog réalisée dans une limite de fortes frictions $\xi \rightarrow +\infty$ une équation de Smoluchowski généralisée

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left[\frac{1}{\xi} (\nabla p + \rho \nabla \Phi) \right], \quad (2.2)$$

qui fait intervenir une équation d'état barotrope $p = p(\rho)$ entièrement déterminée par la fonction $C(f)$. Si on la couple avec un potentiel à longue portée comme le potentiel gravitationnel, on obtient le système de Smoluchowski-Poisson généralisé qui correspond aux modèles étudiés en Sec.2.2.10. Alternativement, dans le cas d'interactions à courte portée, on retrouve l'équation de Cahn-Hilliard qui décrit des séparations de phase. Ce formalisme de « thermodynamique généralisée » couplé à des interactions à longue ou courte portée permet donc d'unifier plusieurs domaines de la physique.

Relaxation violente et stabilité dynamique non linéaire

Des fonctions de distributions non-Boltzmanniennes interviennent également dans le cas de systèmes avec des interactions à longue portée. Pour ces systèmes, le temps de relaxation collisionnel vers la distribution maxwellienne est très long car il augmente comme une puissance du nombre de particules N . Dès lors, l'évolution du système est bien décrit par l'équation de Vlasov (équation de Boltzmann sans collision) sur une échelle de temps très longue. Maintenant, via le phénomène de relaxation violente, l'équation de Vlasov peut conduire spontanément à la formation de structures organisées: galaxies en astrophysique, tourbillons en hydrodynamique, clusters dans le cas du modèle HMF etc. Ces structures cohérentes sont des solutions stationnaires de l'équation de Vlasov qui ne sont pas forcément décrites par la distribution de Boltzmann. En effet, l'équation de Vlasov admet une infinité de solutions stationnaires et le système peut être piégé dans l'une d'entre elles. Dans ce cadre là, les distributions de Tsallis sont des solutions particulières de l'équation de Vlasov qui correspondent à ce qu'on appelle les *polytropes stellaires* en astrophysique. D'autre part, la fonctionnelle de Tsallis est une fonction H généralisée (ou une fonctionnelle de Casimir) particulière. Sa maximization à masse et énergie fixées fournit un critère de stabilité dynamique non linéaire via l'équation de Vlasov [97,98,113].

De ce point de vue, il n'est pas nécessaire d'introduire de « thermodynamique généralisée ». Cependant, comme le critère de stabilité dynamique non linéaire ressemble à un critère de stabilité thermodynamique (généralisé) il est intéressant de développer une *analogie thermodynamique* afin d'analyser la stabilité dynamique non linéaire du système [97,98,113]. Dans cette analogie, la fonction H est similaire à une entropie généralisée, le multiplicateur de Lagrange associé à la conservation de l'énergie est similaire

à l'inverse d'une température, la série d'équilibre $\beta(E)$ est similaire à une courbe calorique etc. Nous avons utilisé cette analogie thermodynamique pour interpréter la première loi d'Antonov en terme d'une inéquivalence d'ensembles [97,98,113]. La première loi d'Antonov dit qu'« un système stellaire est stable vis à vis du système Vlasov-Poisson si l'étoile barotrope correspondante est stable vis à vis du système Euler-Poisson (mais pas la réciproque) ». Nous avons montré que ce résultat était similaire au fait qu'« un système thermodynamique à longue portée est stable microcanoniquement s'il est stable canoniquement (mais pas la réciproque) ».

2.2.10 Particules browniennes auto-gravitantes

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

Les systèmes auto-gravitants suivent une sorte d'organisation révélée par la classification de Hubble pour les galaxies ou par 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 vortex d'un fluide bidimensionnel (voir ci-dessus), 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. Une autre caractéristique de ces systèmes 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 par principe 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 $T < T_c$. 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. Cet effet est bien compris, et n'est souvent pas pris en compte dans les modèles qui conduisent alors à une divergence idéale de la densité centrale (la masse intégrée reste néanmoins bien définie).

Physiquement, la pertinence de travailler dans l'un ou l'autre des ensembles thermodynamiques dépend de la nature du système étudié. Dans le cas où le système n'a pas le temps de se thermaliser lors de l'effondrement (amas globulaires...), l'ensemble canonique peut être pertinent. Au contraire, pour des systèmes fortement collisionnels (gaz autogravitants,...), il est nécessaire de se placer dans l'ensemble microcanonique.

La catastrophe gravitationnelle (à $E < E_c$ ou $T < T_c$) a été étudiée numériquement par de nombreux auteurs, dans le cadre de modèles reposant parfois sur des hypothèses contradictoires. Pourtant, un scénario commun semble se dégager avec l'observation d'un effondrement en un temps fini t_* , où le profil de densité obéit à une loi d'échelle du type (voir Fig. 2.12)

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

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 souvent²⁰). $\alpha = 2$ 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.

P.-H. Chavanis et C. Sire ont étudié ces transitions de phase à l'aide d'un modèle de dynamique gravitationnelle simplifiée. Ce modèle décrit des particules browniennes dont le coefficient de diffusion est proportionnel à la température (donc sans inertie et subissant une forte friction, due par exemple aux collisions entre particules ou à un milieu (gaz...) ambiant), couplées par l'interaction gravitationnelle

²⁰. L'exposant est en général assez facile à calculer par analyse dimensionnelle, et peut dépendre de la situation physique modélisée.

(voir Fig. 2.11). Bien que ce modèle ne soit *a priori* pas pertinent pour la cosmologie, il a l'intérêt de pouvoir être étudié analytiquement, et présente en fait de nombreuses analogies avec la situation réelle qui correspond au cas de particules newtonniennes. En fait, même dans le domaine astrophysique, ce modèle pourrait s'appliquer au transport de poussières dans la nébuleuse solaire et à la formation des planétésimaux (bébés planètes). Dans ce contexte, les particules sont soumises à une force de friction avec le gaz ambiant et à une force stochastique due à la turbulence. De plus, le processus de relaxation violente pour des systèmes stellaires sans collisions introduit par Lynden-Bell présente de fortes similarités avec la dynamique de ce modèle de particules browniennes. Enfin, il a été récemment proposé qu'il devrait être possible d'observer l'effondrement isothermale avec des atomes ultra froids, pour lesquels il est possible de générer une interaction attractive en r^{-1} grâce à une configuration astucieuse de champs laser. Le traitement pertinent de ce système nécessite d'utiliser l'ensemble canonique ce qui nous ramène au modèle de particules browniennes. Nous verrons dans la suite que ce modèle décrit aussi la dynamique diffusive de colonies de bactéries sécrétant une substance sur leur passage (comme les phéromones des fourmis ou des chats...) qui induit une interaction attractive effective entre bactéries, qui prend exactement la forme de la force gravitationnelle. Les états d'équilibre apparaissent comme des maxima locaux de l'entropie

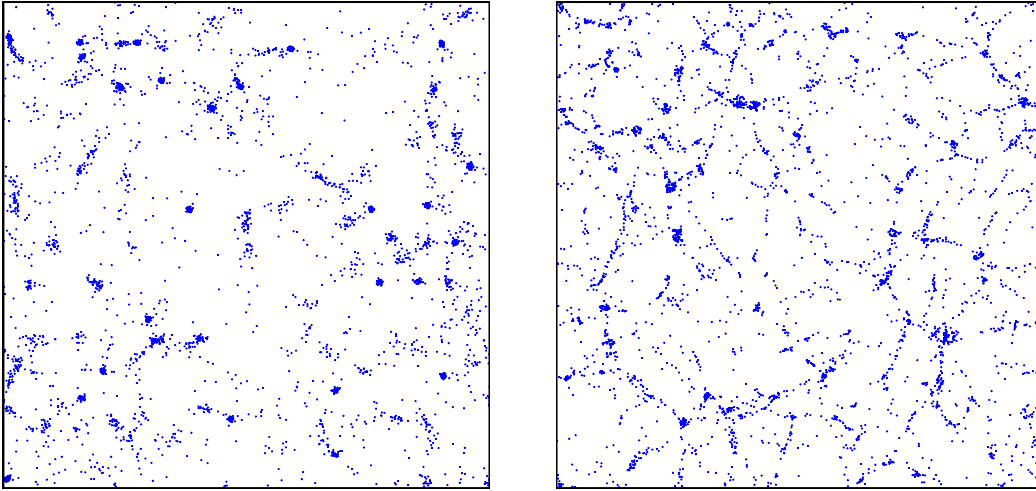


FIG. 2.11 — Simulations de l'évolution d'un gaz de particules browniennes (à gauche) et newtonniennes (à droite) autogravitantes. On note que conformément à ce qui est observé dans notre univers la dynamique newtonienne réelle conduit à l'apparition de filaments entre condensats de matière. Ces filaments sont moins marqués dans le cas brownien. Cependant, l'évolution locale d'un condensat peut être étudiée analytiquement ce qui n'est pas le cas pour des particules newtonniennes pour lesquelles l'existence d'un profil de condensat invariant (type Navarro-Frenk-White) reste une spéculation numérique.

(ensemble microcanonique) ou de l'énergie libre (ensemble canonique). De plus, la dynamique implique une évolution avec un taux maximum de production d'entropie ou de l'opposé de l'énergie libre. Nous avons montré que l'équation dynamique obtenue (Poisson-Schmoluchowski) est équivalente à l'équation de Poisson-Fokker-Planck plus rigoureuse, dans la limite de forte friction.

Il est intéressant de noter que les équations cinétiques décrivant l'évolution du champ de densité d'une population de bactéries en présence d'un milieu nutritif (chémotaxie) sont formellement équivalentes à celle obtenue pour le gaz autogravitant dans l'ensemble canonique.

Dans le cadre de l'équation de Poisson-Schmoluchowski, P.-H. Chavanis et C. Sire ont obtenu une grande variété de résultats analytiques, même dans un volume fini, ce qui leur a permis de décrire la statique, ainsi que la dynamique de la catastrophe gravitationnelle. Seuls les résultats principaux sont résumés ci-dessous :

- Il a été 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). Ce modèle est le premier où un tel résultat a pu être démontré. A noter qu'en dimension trois, la densité de cœur ne diverge pas strictement à E_c ou T_c [106,93,106].
- On trouve que $\alpha_{can.} = 2$ dans le cas canonique, pour lequel on peut calculer la fonction d'échelle $f(x)$ analytiquement en toutes dimensions $d > 2$. De plus, on peut obtenir 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. Enfin, la dynamique à $T = 0$ a été résolue exactement, ce qui conduit à $\alpha = \frac{2d}{d+2}$ en dimension d [106].

- On a 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 $|T - T_c|$ [106]. Dans la référence [103], ces résultats sont justifiés rigoureusement, et les coefficients en facteur de ces estimations qualitatives ont été calculés. Ce système est un exemple rare où l'on peut ainsi montrer que l'évolution conduit inexorablement à une solution d'échelle unique, alors que ce fait est en général admis.
- Le même système a été étudié à deux dimensions [93,103,106,95]. En ce qui concerne la statique, on a reproduit la température critique exacte, ainsi que les exposants critiques déjà obtenus dans le cadre de la théorie conforme (dans l'ensemble canonique, car il a été montré que la catastrophe gravotherme n'existe pas dans l'ensemble microcanonique en $d = 2$). Légèrement au dessus de T_c , 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 $\rho_0(t) \sim r_0^{-2}(t)$ dépend du temps. Ainsi, dans des unités appropriées, la densité au cœur diverge comme $\rho_0(t) \sim c_1 \exp(c_2 \sqrt{t})$, 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 effectif 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, la dynamique exactement à $T = 0$ a été aussi résolue ($\alpha = 2$).

- Dans le cas microcanonique et pour $d = 3$, l'équation pour la fonction d'échelle de la densité f admet une solution pour tout $2 \leq \alpha \leq \alpha_{mic.} = 2.209733\dots$ [106]. Cette dernière valeur $\alpha = \alpha_{mic.}$ correspond à une divergence maximale de l'entropie et de la température du système (par exemple $T(t) \sim (t_* - t)^{-(1-2/\alpha_{mic.})}$), et devrait donc être sélectionnée par la dynamique. Ceci est observé aux temps intermédiaire. Cependant, dans ce modèle où la température est uniforme, on peut montrer que la conservation de l'énergie implique que la température ne peut pas diverger, ce qui conduit à $\alpha = 2$ très proche de t_* , ce qui est observé numériquement. Dans un modèle plus réaliste où la température ne serait pas uniforme, on s'attendrait pourtant à ce que la température dans la région dense diverge, alors que celle-ci doit rester finie dans le halo. Effectivement, dans le modèle le plus simple où la température peut aussi dépendre de la position, l'effondrement se produit avec un régime d'échelle correspondant à une valeur de α strictement plus grande que 2, avec $\alpha = \alpha_{mic.}$ dans une certaine limite. Il est à noter que les simulations de modèles plus réalistes (pour des particules newtoniennes) conduisent aussi à un exposant $\alpha_{mic.} \approx 2.2 \sim 2.3$.
- En dimensions $d > 2$, le système se comporte qualitativement comme en dimension 3, avec $\alpha_{can.} = 2$ (f a été calculée analytiquement) [100,93,106]. Dans le cas microcanonique, on peut justifier 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). Des résultats perturbatifs pour la fonction d'échelle f ont aussi été obtenus.
- En modifiant légèrement l'équation de Poisson-Schmoluchowski [100], on peut l'adapter au cas de particules de Lévy plutôt que browniennes. La statique est modifiée et permet dans certains cas des solutions à support borné (dites polytropiques) indépendamment de la présence d'une boîte. Ce traitement de la statique est alors équivalent à l'approche de Tsallis qui conduit à introduire une thermodynamique généralisée pour les systèmes à longue portée, associé à une entropie de Tsallis $S_q = -(q-1)^{-1} \int [\rho^q - \rho] d^d r$, équivalente à celle de Boltzmann pour $q = 1$. De plus, notre approche conduit à l'analyse quantitative de la dynamique, et en particulier de l'effondrement gravitationnel avec un exposant α connu analytiquement, et dépendant de la dimension spatiale d et de q (voir Fig. 2.12). Enfin, l'équation de Poisson-Schmoluchowski ainsi modifiée est formellement identique à des équations de transport pour une population de bactéries baignant dans un milieu nutritif [100,105,115].

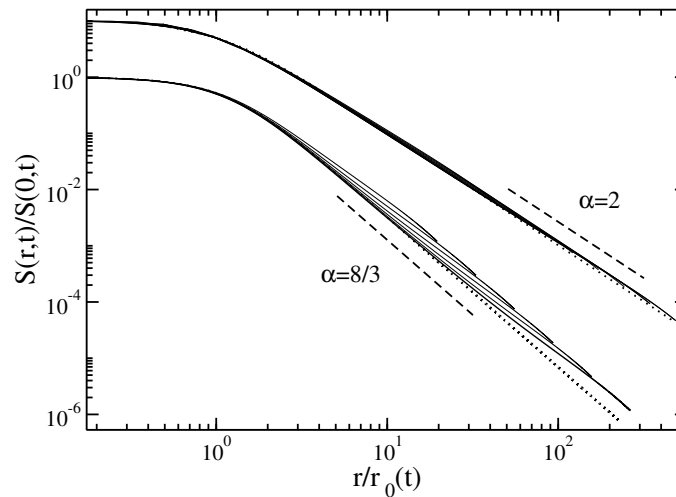


FIG. 2.12 – : Les propriétés d'échelle de la densité, satisfaisant $\rho(r,T) = \rho_0 f(r/r_0)$, sont illustrées numériquement à différents temps correspondant à des densités centrales dans la gamme $10^2 \sim 10^6$ (la masse totale est normalisée à l'unité). La courbe du haut illustre le cas canonique pour des particules browniennes où le profil analytique est tracé en pointillé ($\alpha = 2$). La courbe du bas est un exemple associé à des particules de Lévy (ou à une entropie de Tsallis avec $q \neq 1$), conduisant pour les valeurs de q et d ici considérées à $\alpha = 8/3$ [100].

- Comme expliqué ci-dessus, à basse énergie/température, les systèmes auto-gravitants s'effondrent et il apparaît une singularité en temps fini t_* , où la densité centrale devient infinie. Jusqu'à maintenant toutes les études en restaient là, bien que l'état atteint à $t = t_*$ ne soit pas une solution des équations stationnaires. Il paraît alors naturel de se demander ce qui suit la catastrophe gravothermale (dynamique post-effondrement). Ce problème a été résolu [93], en montrant qu'un condensat central (formation de binaires) se développe, contenant une masse $N_0(t) = \mu_d T^{d/2} (t - t_*)^{d/2-1}$, où d est la dimension spatiale et μ_d une constante universelle. De plus, la masse résiduelle dans le halo disparaît en présentant un profil universel (proche de t_*) du type $\rho(\mathbf{r},t) = \rho_0 f(r/r_0)$, similaire à la dynamique pré-effondrement, mais où cette fois-ci, $\rho_0(t)$ diminue avec le temps et la taille du cœur dense $r_0(t)$ augmente avec le temps, tous les deux de manière universelle. A très grands temps, on peut obtenir des développements perturbatifs (en la température T) de l'échelle de temps caractérisant la décroissance exponentielle du halo, ainsi que de son profil asymptotique. Ce problème est lié à celui de la persistance (probabilité de survie d'un marcheur aléatoire soumis à l'interaction gravitationnelle d'une trappe). Le problème a aussi été résolu analytiquement à $T = 0$ (ensemble canonique), et illustré par de nombreuses simulations numériques à toutes températures, parfaitement décrites par la théorie analytique.
- Avec C. Rosier et M. Ribot (Lyon), le traitement de l'effondrement gravitationnel a été généralisé en présence d'effets de dégénérescence dans l'espace de phase. Ceux-ci peuvent provenir intrinsèquement de la dynamique violente ou de la nature fermionique des particules considérées.
- Avec J. Sopik (étudiant en thèse) la statique et la dynamique d'effondrement a été étudiée pour une population *polydisperse* de masses, ayant des coefficients de diffusion dépendant généralement de la masse [115]. De cette étude exhaustive, le résultat le plus surprenant concerne la dynamique d'effondrement: si la densité totale garde un comportement d'échelle universel identique à ce qui a été décrit ci-dessus, la densité des particules de masse m et de coefficient de diffusion D décroît avec un exposant universel $\alpha_{m,D}$ (ségrégation). $\alpha_{m,D}$ a été calculé perturbativement en grandes dimensions avec un accord quantitatif remarquable dès la dimension 3, et dans la limite de faible dispersion de masses/coefficients de diffusion.
- P.-H. Chavanis et C. Sire [100,113] ont éclairci les liens entre statistique de Tsallis et systèmes gravitationnels. De nombreux auteurs ont suggéré que pour les systèmes à longue portée, la statistique de Tsallis était mieux adaptée que la statistique usuelle de Gibbs-Boltzmann, sans d'ailleurs vraiment en justifier les raisons. Certains profils de densité canoniques peuvent effectivement s'interpréter en ces termes. Pour résumé, on peut montrer que l'apparition de ces profils doit être interprétée de façon dynamique plutôt que thermodynamique. Dans ce cadre, l'équation de Vlasov-Poisson ne

sélectionne pas nécessairement une solution compatible avec une interprétation à la Tsallis, qui ne constitue qu'une solution particulière. En fait chaque solution, qui peut être fortement influencée par les conditions initiales, est associée à une fonctionnelle qui peut être réinterprétée comme une entropie dans le cadre d'une approche pseudo-thermodynamique. La statistique de Tsallis ne joue alors aucun rôle particulier, et n'a alors aucune justification purement thermodynamique. P.-H. Chavanis et C. Sire ont d'ailleurs montré que les tentatives de certains auteurs pour donner une interprétation dans le contexte gravitationnelle au mystérieux paramètre q paramétrisant la statistique de Tsallis, constituait en fait une pure tautologie du type $q = q$!

- L'étude de la dynamique d'un gaz autogravitant a été étendue au cas de l'espace infini. Le cas bidimensionnel autorise l'effondrement de matière, alors qu'on observe des solutions d'échelles diffusives en $d > 2$ qui sont corrigées des effets gravitationnels en $d \leq 4$ [95,96]. Une étude approfondit des conséquences du théorème du viriel généralisé est présenté dans ces références.
- Un projet en cours d'étude consiste à appliquer ces méthodes à la dynamique de la transition de Bose-Einstein. De façon remarquable, l'équation décrivant la dynamique dans l'espace des phases est très similaire à l'équation de Schmolucowsky-Poisson (la concentration des bosons sur la mode $k = 0$ sous T_{BE} étant le pendant de l'effondrement gravitationnel).

2.3 Cohérence quantique & information quantique

Cette **équipe** est construite autour de six permanents: **D. Braun, R. Fleckinger, K. Frahm, B. Georgeot, O. Giraud & D. L. Shepelyansky**. D. Braun a été recruté comme professeur à l'université en septembre 2004, et O. Giraud comme CR2 CNRS en octobre 2005 (il était précédemment postdoc CNRS dans notre équipe pendant un an).

Au total, pendant les années 2002-2005, 48 articles scientifiques ont été produits, dont 42 dans des revues internationales à comité de lecture. Les thématiques de recherche ci-dessous sont ou ont été soutenues financièrement par:

-le gouvernement américain (NSA and ARDA under ARO contract No. DAAD19-01-1-0553 on « quantum computing ») (2000-2004).

- la communauté européenne (RTN contract HPRN-CT-2000-0156 « Quantum transport on an atomic scale » (2000-2004), et contrat IST-FET IST-2001-38869 EDIQIP « Effects of decoherence and imperfections for quantum information processing », (2002-2005))

-le ministère de la recherche (ACI Nanosciences-nanotechnologies LOGIQUANT (2003-2004) et PPF « information quantique » (2003-2006))

L'équipe a été initialement formée autour de chercheurs étudiant le problème général du comportement quantique des systèmes classiquement chaotiques, ou chaos quantique, qui s'est développé depuis quelques décennies dans le monde. En effet, la notion de chaos, par opposition à régularité, est maintenant bien définie et reconnue en mécanique classique, et possède des applications dans toutes les sciences. La mécanique classique étant une approximation de la mécanique quantique, il est naturel de s'intéresser à l'équivalent quantique de ces propriétés. L'équation de Schroedinger étant linéaire les définitions du chaos classique ne peuvent s'appliquer directement aux systèmes quantiques. De nombreux travaux ont permis de développer des outils qui permettent de caractériser et étudier les systèmes quantiques chaotiques, comme les formules de trace semi-classiques, la théorie des matrices aléatoires, ou la théorie de la localisation dynamique.

Les thèmes principaux de recherche de l'équipe se sont structurés pour la période 2002-2005 autour de l'application des idées et méthodes du chaos quantique à la physique du solide, à l'ordinateur quantique et aux systèmes dissipatifs.

Au delà de nos recherches pendant cette période, les travaux antérieurs de l'équipe dans d'autres domaines ont motivé des recherches d'autres groupes dans le monde en 2002-2005. Par exemple, la théorie développée dans notre groupe en 1997 sur la localisation dynamique dans les billiards rugueux²¹ a été récemment confirmée expérimentalement dans les billards micro-onde (Phys Rev E v. 70, 056209, 2004, groupe de Sirko à Varsovie) et dans les microcavités laser rugueuses (PNAS, vol.101, 10498, 2004, groupe de Hui Cao à Princeton).

21. K.M.Frahm and D.L.Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. v.78 (1997) p.1440

2.3.1 Interaction et désordre dans les systèmes de physique du solide à plusieurs corps

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 particules²². 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 2002-2005. 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 superordinateurs 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 [139].

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.

22. D.L.Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. v.73 (1994) p.2607

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 [147].

2.3.2 Effets des imperfections sur le calcul quantique

Travaux précédents

Les questions ci-dessus sont liées au problème 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.

Des progrès technologiques récents ont permis aux expérimentateurs dans ce domaine de réaliser d'importantes percées. Des systèmes de jusqu'à sept qubits ont été réalisés en utilisant les spins nucléaires de molécules par résonance magnétique nucléaire (RMN), et l'avancée des recherches sur la physique des pièges à ions suggère que dans les trois prochaines années un ordinateur quantique formé d'ions piégés de trois ou plus de qubits pourra être construit. Des réalisations fondées sur la physique du solide sont en cours d'élaboration, utilisant des SQUIDS pour construire des ordinateurs quantiques de quelques qubits, en particulier en France dans les groupes de Saclay et Grenoble. Ceci montre que dans les prochaines années des ordinateurs quantiques de petite taille vont être implémentés expérimentalement dans divers types de systèmes physiques. Le problème principal pour opérer ces systèmes sera de contrôler les effets de décohérence et d'imperfections qui apparaissent durant les processus d'information quantique.

Les études publiées jusqu'à présent envisageaient surtout des systèmes de qubits idéaux sans imperfections, et la décohérence était surtout perçue comme due au couplage avec le monde extérieur. Notre équipe avait étudié dans la période 1996-1999 l'apparition du chaos quantique dans des systèmes de particules en interaction en présence de désordre. Ces travaux nous ont donné l'idée d'appliquer le même type de techniques à l'ordinateur quantique, considéré comme un système physique. Dans nos premiers travaux dans ce domaine en 1999-2000²³ nous avons introduit un modèle réaliste d'ordinateur quantique isolé, mais tenant compte des imperfections présentes dans tout système physique, et montré que la présence de ces imperfections entraîne l'apparition de décohérence et de propriétés correspondant au chaos quantique. Le modèle comporte des fluctuations dans la différence d'énergie entre les deux états de chaque qubit, ainsi qu'une interaction résiduelle aléatoire entre les différents qubits. Une interaction entre les qubits est nécessaire, car il faut être capable de les faire évoluer de manière cohérente, et ceci entraîne nécessairement la présence d'une interaction résiduelle statique non contrôlée. L'ordinateur quantique est ainsi décrit comme un système à plusieurs corps en interaction, similaire à ceux que nous avons étudiés ces dernières années. On s'attend donc à ce que la présence de l'interaction résiduelle mène à l'introduction d'erreurs et de décohérence dans le système, la question fondamentale étant la loi d'échelle à laquelle obéissent ces erreurs: la densité d'états croît en effet exponentiellement avec le nombre de qubits,

23. B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, Phys. Rev. E v. 62 (2000) p.3504; ibid. v.62 (2000) p.6366

faisant craindre l'existence d'une loi d'échelle exponentielle qui condamnerait la possibilité même d'un ordinateur quantique de taille raisonnable (~ 100 ou 1000 qubits). Nous avons montré que la présence de l'interaction résiduelle menait bien à l'apparition du chaos quantique qui se manifeste par l'ergodicité des fonctions d'onde et l'existence de fluctuations spectrales proches de celles de matrices aléatoires. Dans ce régime, le fonctionnement de l'ordinateur est très difficile, car les qubits individuels ne sont plus bien définis. 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, même dans un système totalement découplé du monde extérieur. Néanmoins, nous avons pu montrer que cette transition a lieu à une valeur de l'interaction qui décroît linéairement avec la taille du système, même si la distance entre niveaux voisins décroît, elle, exponentiellement. Ceci ouvre une « fenêtre » de paramètres où la construction d'un ordinateur quantique avec un grand nombre de qubits demeure possible. Nous avons également étudié l'évolution dans le temps du système, et montré qu'en dessous du seuil de chaos un état quantique d'ordinateur quantique idéal peut être maintenu et contrôlé, alors que au-dessus de ce seuil ce même état se décompose rapidement et disparaît. Un état spécifique crée pour effectuer un calcul quantique va se décomposer au cours du temps en une superposition exponentielle d'autres états et l'ordinateur ne sera plus opérable. Cependant, ce processus a lieu à une échelle de temps qui n'est pas exponentiellement petite. Le message général de ces études est encourageant pour le calcul quantique: bien que des échelles exponentielles soient présentes, et nécessaires pour l'efficacité du calcul quantique, les lois d'échelles des erreurs sont seulement polynomiales, ce qui laisse ouverte la possibilité d'un ordinateur quantique de taille raisonnable. Ce travail a été remarqué par un article de presse dans la version internet de la revue Nature.

Erreurs aléatoires dans les portes quantiques

Ce travail a été poursuivi en 2002-2005 par l'étude d'autres types d'imperfections. Celles considérées ci-dessus sont statiques, et donc présentes même si l'ordinateur quantique n'effectue aucun calcul, en quelque sorte elles concernent le « hardware ». Si un algorithme quantique est effectué par l'ordinateur, une séquence précise de transformations unitaires élémentaires (« portes quantiques ») doit être implémentée. De nouveau, ces opérations ne pourront se faire de manière parfaite, et des erreurs de « software » vont apparaître. Nous avons donc étudié l'effet de portes imparfaites (i.e. chaque porte est multipliée par une transformation unitaire aléatoire proche de l'identité) sur des algorithmes quantiques. Les algorithmes utilisés, décrits dans la section suivante, permettent la simulation de systèmes physiques complexes, classiques ou quantiques, par un ordinateur quantique. Des arguments analytiques couplés à des études numériques à grande échelle utilisant des superordinateurs (disponibles au centre CalMiP à Toulouse et à l'IDRIS à Orsay) nous ont permis de préciser les lois d'échelles des effets des imperfections et de les vérifier numériquement jusqu'à 28 qubits. A notre connaissance, ce nombre constitue le record mondial du nombre de qubits numériquement simulés à ce jour. Nos études ont d'abord concerné la fidélité (projection de l'état obtenu en présence d'imperfections sur l'état idéal obtenu sans imperfections). Nos travaux ont permis d'établir la loi d'échelle de la fidélité pour les algorithmes considérés, et de vérifier qu'elle était toujours polynomiale, à la fois en l'amplitude des imperfections et en le nombre de qubits. Ceci est vrai même pour la simulation de systèmes classiques chaotiques, où les erreurs classiques, elles, sont amplifiées exponentiellement vite par la dynamique. Ceci confirme que les algorithmes considérés peuvent être effectivement implémentés sur des ordinateurs quantiques réalistes [133,141]. Nous avons également étudié l'effets de telles imperfections sur d'autres observables. Nous avons considéré un algorithme simulant un système quantique complexe, le rotateur pulsé, un des modèles principaux du chaos quantique. Plusieurs quantités physiques caractérisant le système ont été étudiées, par delà la fidélité, et qui pourraient être accessibles aux expérimentateurs. Pour toutes les quantités considérées, les lois d'échelles sont polynomiales 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 polynomiales 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 2.13 [145]).

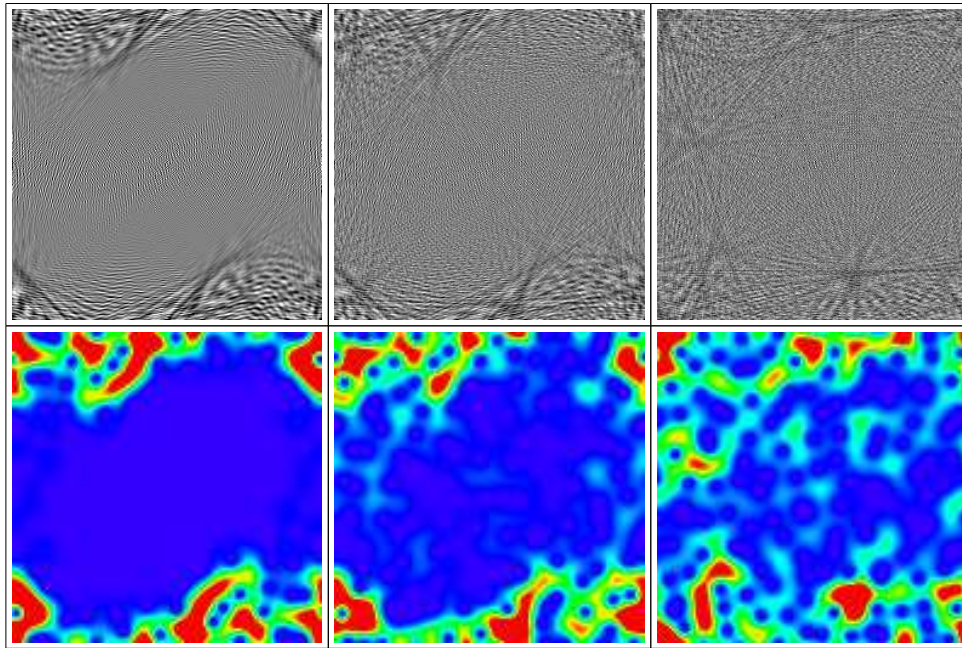


FIG. 2.13 –: Fonction de Wigner (haut) et de Husimi (bas) du rotateur pulsé simulé sur un ordinateur quantique de 7 qubits, avec un bruit aléatoire dans les portes quantiques (de gauche à droite $\epsilon = 0$, $\epsilon = 0.002$, $\epsilon = 0.004$). Les couleurs varient de bleu ou blanc (minimum) à rouge ou noir (maximum). [145]

Imperfections statiques

D'autres travaux nous ont permis d'étudier l'effet des imperfections statiques pendant qu'un algorithme quantique est effectué. En effet, les travaux antérieurs exposés ci-dessus s'appliquaient au « hardware » de l'ordinateur quantique, c'est-à-dire sans qu'aucun algorithme quantique ne soit effectué. Une première étude a concerné les 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 [136,142].

Un autre travail [149] 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 de paramètres, à la fois en amplitude des erreurs et en nombre de qubits (voir figure 2.14). 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.

Une étude plus complète publiée dans [154] a permis de développer une théorie analytique précise des effets des imperfections statiques sur un algorithme simulant un système quantique chaotique. Il a été montré que la décroissance de la fidélité correspond à une combinaison d'une loi exponentielle et d'une loi Gaussienne. Deux échelles de temps sont présentes, l'une d'entre elles est donnée par la règle d'or de Fermi et est similaire au temps de Thouless dans les systèmes mésoscopiques, tandis que l'autre est donnée par le temps de Heisenberg proportionnel à la dimension de l'espace de Hilbert de l'ordinateur quantique. Cette loi théorique obtenue au moyen de la théorie des matrices aléatoires est universelle, au moins pour un ordinateur quantique simulant un système chaotique. Des simulations numériques extensives utilisant des superordinateurs ont permis de confirmer cette théorie sur des valeurs de la fidélité variant de 10 ordres de grandeur (voir illustration sur la figure 2.15 à droite). Il a été également observé que pour les systèmes intégrables la situation est plus complexe et nécessite d'autres études. Ce travail a été sélectionné par European Journal of Physics D pour être leur premier « highlight ».

En particulier, ce travail ne suffit pas pour caractériser complètement l'effet des imperfections sta-

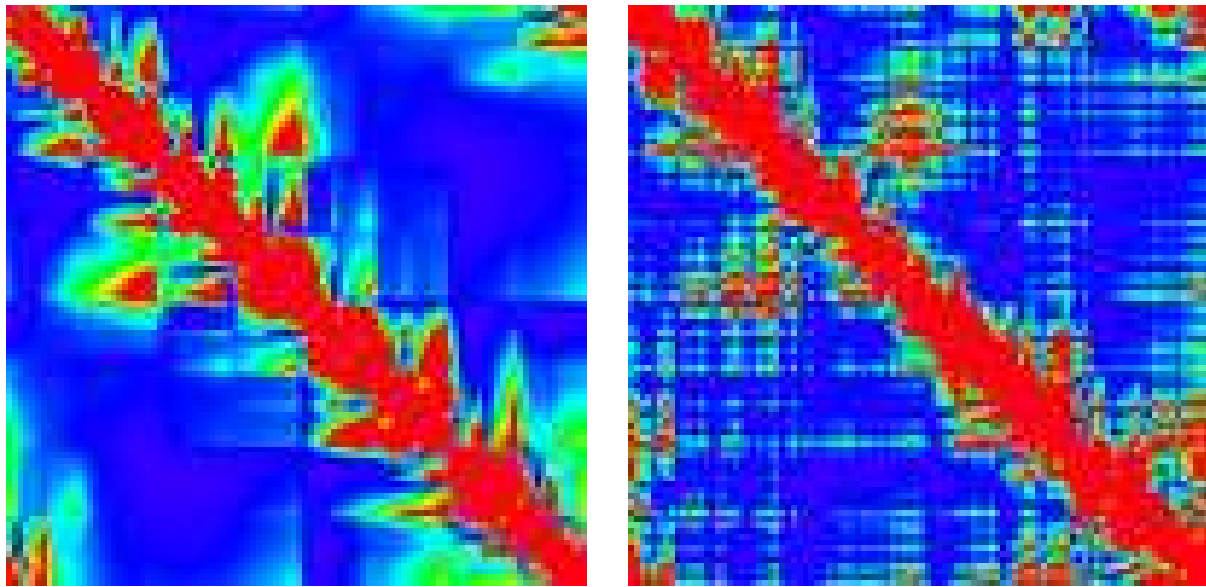


FIG. 2.14 –: *Éléments de matrice d'un modèle dynamique fondé sur la transformée d'ondelettes dans la base computationnelle sur un ordinateur quantique de 12 qubits. A gauche: ordinateur parfait, à droite: ordinateur avec erreurs statiques modérées ($\epsilon = 0.0005$)*[149].

tiques sur certains algorithmes très connus comme celui de Grover (recherche dans une base de donnée sans structure). Ce problème a été analysé dans [160]. Il a été montré que le système effectuait une transition d'une phase régulière vers une phase chaotique quand l'importance des imperfections augmente. La frontière entre les deux phases diminue polynomialement en fonction du nombre de qubits, et est donc exponentiellement plus large que la fréquence des oscillations de Grover. Dans la phase régulière, l'algorithme reste robuste en présence d'imperfections, et conserve le gain quadratique par rapport au calcul classique. Dans la phase chaotique, l'algorithme est complètement détruit.

Enfin, après ces études qui précisent l'effet des imperfections statiques sur différents algorithmes, la question de leur correction a été abordée. Dans le travail [162], une méthode générique a été développée qui permet de corriger les erreurs cohérentes produites par les imperfections statiques. Cette méthode nommée PAREC est fondée sur l'application répétée d'opérateurs de Pauli qui changent la base computationnelle. Par ce moyen, le rôle des qubits est changé de manière aléatoire, ce qui élimine la partie cohérente des erreurs statiques et augmente paramétriquement le temps maximal durant lequel un calcul quantique peut être réalisé correctement. Cette méthode ne nécessite aucun qubit supplémentaire, et les simulations numériques ont montré qu'elle pouvait améliorer la fidélité des calculs par deux ordres de grandeur (voir illustration sur la figure 2.15 à gauche).

Dissipation

Les deux types d'erreurs envisagés ci-dessus ont la particularité d'être unitaires. Cependant, des erreurs non-unitaires sont également présentes, et nécessitent des méthodes particulières pour être étudiées. Nous avons implémenté numériquement la méthode des « trajectoires quantiques », utilisée par exemple en optique quantique, pour obtenir des résultats sur ce type de problème. Un travail [166] a permis d'étudier les effets de décohérence dissipative sur un ordinateur quantique simulant la dynamique d'un système physique présentant du chaos quantique (application « sawtooth »). Il a été montré que la fidélité décroît exponentiellement avec le temps, le taux de décroissance étant proportionnel au nombre de qubits, au nombre de portes quantiques nécessaires pour la simulation, et au taux de dissipation par porte quantique. Dans la limite d'une forte dissipation, l'algorithme quantique génère un attracteur étrange qui peut avoir différents types de structure. Ce travail précise les effets de la décohérence externe sur un ordinateur quantique effectuant un algorithme.

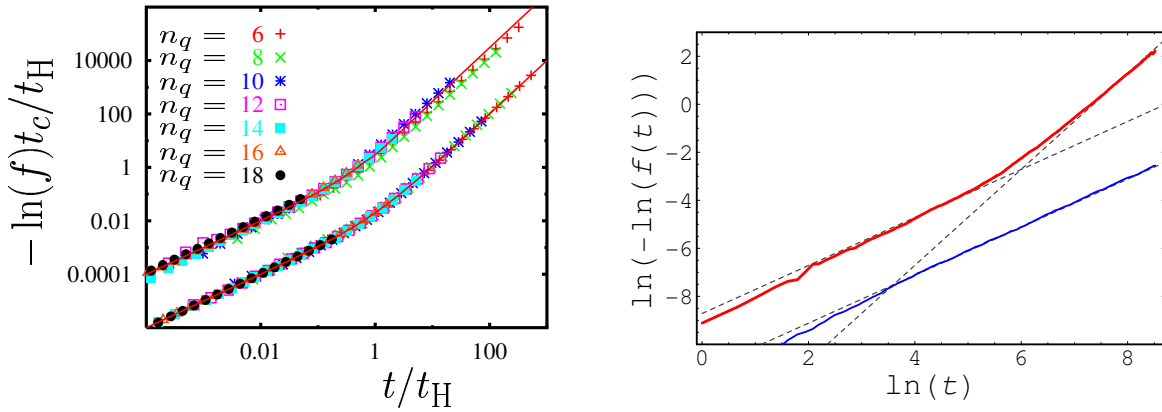


FIG. 2.15 – : **A GAUCHE: théorie pour la décroissance de la fidélité f en présence d'imperfections statiques [154]:** La courbe supérieure montre: $-\ln(f)t_c/t_H$ comme fonction de t/t_H avec les deux échelles de temps théoriques $t_c = (\epsilon^2 n_q n_g^2)^{-1}$ et $t_H = 2^{n_q}$ (n_q est le nombre de qubits, n_g le nombre de portes quantiques pour une itération de l'algorithme). La ligne pleine correspond au résultat théorique obtenu à partir de la théorie des matrices aléatoires. La courbe inférieure (décalée par un facteur 0.01) correspond à $-\ln(f)\tilde{t}_c/\tilde{t}_H$ versus t/\tilde{t}_H avec \tilde{t}_c et \tilde{t}_H obtenues par un fit pour chaque valeur de n_q et ϵ . La ligne pleine correspond au résultat analytique: $y = x + x^2$ (avec $y = -\ln(f)\tilde{t}_c/\tilde{t}_H$ et $x = t/\tilde{t}_H$). Les points correspondent aux calculs numériques pour $\epsilon = 5 \cdot 10^{-7}$ (et $6 \leq n_q \leq 18$). **L'accord entre théorie et résultats numériques est quasiment parfait sur 10 ordres de grandeur!** **A DROITE: résultats de la technique PAREC de correction d'erreur [162]** Fidélité en présence d'imperfections statiques (courbe supérieure rouge) et la même avec correction d'erreur PAREC (courbe inférieure bleue); les lignes pointillées montrent le meilleur fit pour une décroissance linéaire ou quadratique. **La correction d'erreurs élimine la décroissance gaussienne, et améliore la fidélité de plusieurs ordres de grandeur.**

2.3.3 Nouveaux algorithmes quantiques

Simulation de systèmes quantiques

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 en 2001 par notre groupe²⁴, 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 autre algorithme quantique efficace avait été également développé, permettant la simulation de l'application « dent de scie » (sawtooth)²⁵. 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 démontrer la robustesse de ces résultats en présence d'un bruit modéré [143]. Un autre travail a montré qu'un troisième type de système quantique, correspondant à un potentiel de double puit,

24. B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. v. 86 (2001) p. 2890

25. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. v.87 (2001),227901

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 [137]. 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 effectuée 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 [151].

Dans le but d'étudier et comparer différentes manières de simuler les systèmes quantiques, un autre système complexe a été étudié, le modèle de Harper pulsé [158]. Il présente une riche variété de phénomènes selon les paramètres, comme spectres fractals (« papillon de Hofstadter »), diffusion anormale, délocalisation partielle, et peut décrire des électrons en présence d'un champ magnétique. Trois algorithmes quantiques différents ont été élaborés, permettant de simuler efficacement l'opérateur d'évolution du système avec différentes précisions en utilisant différentes ressources. Suivant les paramètres choisis, le système peut être proche de l'intégrabilité, localisé ou partiellement délocalisé. Dans chaque cas nous avons identifié des quantités liées au transport ou au spectre qui peuvent être obtenues plus efficacement sur un ordinateur quantique. Dans la plupart des cas, un gain polynomial est obtenu. Nous avons aussi étudié les effets des imperfections statiques sur ces quantités, et montré que suivant le régime de paramètres choisi, des comportements très différents sont observés. En effet, certaines quantités peuvent être obtenues de manière robuste avec des niveaux modérés d'imperfections, alors que d'autres sont exponentiellement sensibles. En particulier, le seuil de délocalisation devient exponentiellement petit dans le régime partiellement délocalisé. Nos résultats montrent que des phénomènes intéressants peuvent être observés avec 7-8 qubits et peuvent être mesurés correctement en présence d'un niveau modéré d'imperfections.

Un dernier système dont nous avons étudié la simulation quantique est un réseau « small-world » désordonné. De tels réseaux ont été beaucoup étudiés en physique statistique; ils ont la particularité de permettre d'aller d'un point à un autre au moyen d'un nombre réduit de liens, et ont été appliqués à de nombreux réseaux biologiques, sociaux ou économiques. Nous avons montré que la version quantique d'un tel réseau en présence de désordre manifeste une transition de délocalisation. Nous avons construit un algorithme quantique polynomial pour simuler un tel système, et montré que son efficacité dépendait des paramètres du réseau, et était toujours supérieure à celle de l'algorithme classique correspondant [168].

Un problème récurrent dans la conception d'algorithmes quantiques simulant des systèmes quantiques est de préciser la complexité totale du processus en tenant compte du nombre de mesures quantiques nécessaires. En effet, effectuer un grand nombre de mesures quantiques permet d'accumuler des statistiques et d'obtenir une observable avec suffisamment de précision, mais exige aussi de recommencer la simulation plusieurs fois, ce qui peut augmenter le temps de calcul de manière parfois énorme. Pour préciser ce point, nous avons étudié plusieurs stratégies pour extraire des fonctions d'espace des phases (fonctions de Wigner et de Husimi) à partir d'une simulation quantique, et comparé leur efficacité. Ces stratégies incluent la mesure d'un qubit sonde, la mesure directe d'une fonction d'espace des phases construite sur un registre quantique, l'utilisation de la transformée d'ondelettes quantique et l'amplification d'amplitude, une méthode inspirée de l'algorithme de Grover de recherche d'une base de donnée. Ces différentes méthodes ont été testées numériquement sur une simulation quantique du rotateur pulsé. Nos résultats ont montré que l'utilisation de la transformée d'ondelette et de l'amplification d'amplitude sont les stratégies les plus efficaces. Nous avons aussi appliqué les mêmes méthodes à l'étude d'images classiques à deux dimensions, et montré que l'utilisation de la transformée d'ondelette quantique permet de diminuer massivement le nombre de mesure quantiques nécessaires, mais au prix d'une perte importante d'information [165].

Simulation de systèmes classiques

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 [134]. De plus, si les erreurs classiques d'imprécision sur la position des points (dues 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 polynomialement 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 [133]. Un travail 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 [141]. 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 [155].

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 retrouver la voix humaine ou le son d'une fonction d'onde complexe [231].

2.3.4 Information quantique, intrication et mesure

Intrication

L'intrication est une ressource importante en information quantique, au coeur du paradoxe EPR et de nombreuses applications de l'information quantique comme la téléportation. Curieusement, elle est encore mal comprise et même sa mesure pose de nombreux problèmes. Plusieurs travaux de l'équipe ces dernières années se rattachent à l'étude de l'intrication dans différents contextes.

Un premier travail a étudié l'évolution de l'intrication (intrication bipartite entre deux qubits) dans un ordinateur quantique effectuant une simulation d'un système de chaos quantique. Les résultats ont montré que l'intrication décroissait exponentiellement avec un taux égal au taux de relaxation diffusive du chaos classique sous-jacent. Cette décroissance stoppe à un niveau résiduel qui lui-même décroît exponentiellement avec le nombre de qubits [146].

Un travail plus théorique s'est attaché aux propriétés générales de l'intrication, et a permis de démontrer l'équivalence de conjectures concernant l'additivité de l'intrication de formation (une des mesures possibles de l'intrication pour un état mixte). Ce résultat, obtenu simultanément et indépendamment par P. Shor, l'un des pères fondateurs du domaine, et A. Poméransky à Toulouse, permet de clarifier les propriétés des différentes mesures de l'intrication proposées, un sujet toujours non complètement compris à l'heure actuelle [150].

Un travail plus numérique a récemment permis d'explorer la relation entre intrication et chaos quantique. Il a été observé déjà par d'autres groupes que l'évolution d'un système présentant du chaos quantique produisait de l'intrication multipartite d'une manière similaire à une matrice aléatoire. Nous avons étudié l'intrication formée durant l'évolution de systèmes intermédiaires entre chaos et intégrabilité. De tels systèmes ont été récemment mis en évidence à la transition métal-isolant ou dans des billards diffractifs, et contrairement aux systèmes mixtes qui s'interprètent comme des superpositions de zones

chaotiques et régulières, le système dans son ensemble possède des propriétés intermédiaires. Nous avons montré que l'intrication multipartite produite par de tels systèmes diffère des prédictions des matrices aléatoires, et peut être reliée aux propriétés des éléments de matrice de l'opérateur d'évolution et au caractère fractal des vecteurs colonne et des vecteurs propres. Ces systèmes sont très faciles à simuler sur des ordinateurs quantiques même de petite taille, et pourraient servir de générateur d'opérateurs pseudo-aléatoires possédant des propriétés fractales[171]

Un dernier travail, effectué par D. Braun, concerne la production d'intrication entre deux sous-systèmes. Un mécanisme nouveau a été proposé, par lequel deux sous-systèmes découplés mais en contact avec un même bain thermique peuvent s'intriquer au cours du temps. Ce résultat est contre-intuitif, car un bain thermique crée de la décohérence et mène habituellement à une perte d'intrication. Il a été montré dans [174] que le mécanisme pouvait utiliser comme bain thermique le rayonnement thermique électro-magnétique dans l'espace libre, pertinent comme source de chaleur pour tout système avec des particules chargées. Le couplage à ce bain thermique commun introduit une interaction effective dipolaire, qui mène à une lente création d'intrication sur quelques dizaines de micro-mètres pour des doubles puits quantiques. Une expérience vérifiant ce résultat a été proposée.

Mesure quantique

Un autre problème général de l'information quantique, et même de la mécanique quantique en général, est la mesure quantique. Ce phénomène intervient de manière cruciale en mécanique quantique, mais est décrit par des axiomes spécifiques dont la signification précise est toujours l'objet de débats dans la communauté scientifique. La précision de plus en plus grande des expériences permet désormais d'envisager une étude plus détaillée du processus de mesure, et de ses effets sur un système physique.

Une première 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 [153].

Un deuxième travail a permis de modéliser le processus de mesure lui-même [167]. Dans cette étude, le détecteur est un objet quasi-classique dont la dynamique est décrite par le rotateur pulsé; il est couplé à un qubit. Dans le régime de chaos quantique, le détecteur se comporte comme un bain chaotique et induit de la décohérence sur le qubit. Les taux de déphasage et de relaxation ont été étudiés, montrant que ce modèle déterministe reproduit plusieurs aspects d'un bain ohmique. De plus, pour un couplage suffisamment fort entre détecteur et qubit, le taux de déphasage est donné par le taux d'instabilité exponentielle de la dynamique du détecteur (exposant de Lyapounov). Il a aussi été montré que pour le fort couplage le détecteur mesure correctement l'un des deux états du qubit. Pour un couplage faible, en raison du chaos l'évolution du détecteur est très sensible à l'état du qubit, mais il n'est pas évident d'en extraire de l'information.

2.3.5 Chaos quantique dissipatif

Une nouvelle direction de recherche a été initiée pendant la période 2002-2005. Elle concerne l'étude du chaos quantique dans un contexte de dynamique dissipative. Ce thème a des liens avec l'étude de la décohérence dans un ordinateur quantique, mais ouvre aussi sur des applications nouvelles des techniques du chaos quantique, avec des applications expérimentales possibles en physique du solide ou optique. L'effet cliquet (« ratchet ») qui apparaît dans ce type de dynamique a également des applications en biologie (moteurs moléculaires, etc...).

Le premier travail dans cette direction a consisté à étudier des particules dans un potentiel asymétrique pulsé en présence d'un environnement dissipatif. En utilisant la méthode des trajectoires quantiques, il a été possible de montrer numériquement l'apparition d'un effet cliquet lié au chaos quantique dissipatif. Un transport dirigé a été mis en évidence, émergeant d'un attracteur étrange quantique. Ce modèle présente une transition d'un comportement quantique vers un comportement classique pour les petites valeurs de la constante de Planck effective, en accord avec le principe de correspondance. Il peut être implémenté expérimentalement au moyen d'atomes froids dans des réseaux optiques [161].

Un système dissipatif voisin a ensuite été étudié, dans lequel l'effet cliquet est absent. L'étude numérique a montré que pour une forte dissipation, la fonction d'onde se concentre en un paquet d'onde compact qui suit la dynamique classique et dont la taille est proportionnelle à la constante de Planck

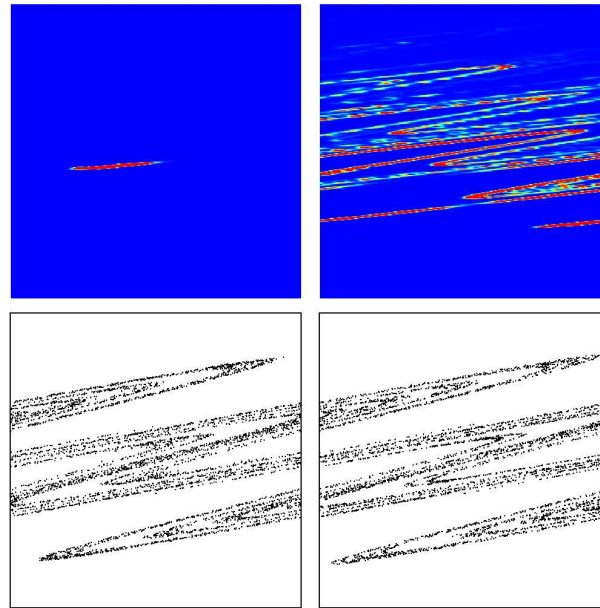


FIG. 2.16 – **Transition entre effondrement et explosion du paquet d’onde dans un système de chaos quantique dissipatif [172].** *En haut: fonctions de Husimi dans l’espace de phase pour une seule trajectoire quantique après 300 itérations dans le régime d’effondrement (forte dissipation) (à gauche) et dans celui d’explosion (faible dissipation) (à droite). Le paquet d’onde initial est le même dans les deux cas. La couleur varie suivant l’intensité de bleu (zéro) à rouge (maximum). En bas: section de Poincaré quantique (à gauche), obtenue à partir de valeurs moyennes de x, p dans le cas en haut à gauche, et contrepartie classique (à droite).*

(« effondrement » du paquet d’onde). Pour une dissipation plus faible, l’instabilité de la dynamique quantique à l’échelle de temps d’Ehrenfest domine et conduit à une « explosion » du paquet d’onde. Ces résultats sont illustrés sur la figure 2.16. La transition entre effondrement et explosion se produit quand l’échelle de temps de la dissipation dépasse le temps d’Ehrenfest. Pour un système intégrable, l’explosion est pratiquement éliminée et seul l’effondrement est présent [172].

Un dernier travail a étudié numériquement le phénomène de synchronisation quantique dans un système dissipatif forcé périodiquement. Nos résultats montrent que pour des petites valeurs de la constante de Planck \hbar l’escalier du diable classique reste robuste en présence des fluctuations quantiques, alors que pour des valeurs plus grandes de \hbar les plateaux de synchronisation sont détruits. Ce phénomène de synchronisation quantique est similaire aux plateaux de Shapiro dans les jonctions Josephson, et peut être réalisé expérimentalement avec des atomes froids [173].

Les effets de radiation micro-onde sur le transport électronique dans des structures mésoscopiques ou nanoscopiques ont été étudiées en parallèle dans [159,163,164]. Un modèle proposé par Galton en 1889 pour étudier l’apparition de lois statistiques à partir de la dynamique consiste en un réseau triangulaire de disques rigides. Il a été démontré par Sinai dans les années soixante que ce système, appelé aussi gaz périodique de Lorentz, est complètement chaotique. La dynamique est également chaotique si l’on remplace les disques par des demi-disques orientés dans la même direction. Dans ce cas, la symétrie d’inversion est brisée mais un transport dirigé demeure interdit par le principe du bilan détaillé. Ceci reste vrai en présence d’une force polarisée monochromatique produite par radiation micro-onde. Cependant, quand de la dissipation est également présente, il a été montré dans [159] qu’un nouvel état stationnaire apparaît à partir du chaos. Il est caractérisé par un transport dirigé qui peut être efficacement contrôlé par la polarisation micro-onde même si la force moyenne est nulle. La vitesse du transport est proportionnelle au taux de dissipation. Cet effet étant universel, il existe également pour un gaz de Maxwell thermostatté se déplaçant entre des demi-disques en présence d’un champ micro-onde [163]. La technologie actuelle permet de réaliser le système de Galton avec des demi-disques au moyen d’un gaz d’électrons à deux dimensions dans un super-réseau d’« antidot » à l’échelle micrométrique. Dans ce cas, la théorie prédit l’apparition de courants importants induits par les champs micro-ondes. Ceci ouvre de nouvelles perspectives pour le contrôle à haute fréquence du transport en présence de dissipation et chaos à l’échelle nanoscopique. Des expériences pour étudier cet effet sont en cours à Grenoble (J.-C.Portal), Novossibirsk

(Z.D.Kvon) et New-York (S.Vitkalov).

2.3.6 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 puit 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 [140]. De nombreuses applications sont envisageables, astrophysiques (étoiles, atmosphères planétaires), géophysiques (noyau terrestre), océanographiques, etc.

2.3.7 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 $1/t^3$ [138].

Les états excités d'une chaîne d'atomes décrite par le modèle de Frenkel-Kontorova classique ont été étudiés [135]. 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 [144] 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.

Dans le cadre des études de systèmes physiques intermédiaires entre les systèmes chaotiques et les systèmes intégrables, nous avons obtenu l'expression analytique du facteur de forme semi-classique à l'origine pour une certaine classe de billards avec barrière [169]. Ce résultat analytique vient à l'appui d'une conjecture existant pour les systèmes intermédiaires.

Par ailleurs, nous avons mis en évidence dans [170] le lien entre les billards isospectraux (paires de billards ayant une forme différente mais les mêmes niveaux d'énergie) et les objets mathématiques que sont les espaces projectifs finis (eux-mêmes liés aux espaces vectoriels sur des corps finis). Ce lien permet d'une part de mieux comprendre les mécanismes menant à l'isospectralité, et d'autre part de démontrer une relation entre les fonctions de Green des billards isospectraux.

2.3.8 Thèses, postdocs, habilitations.

- Gaëtan Caldara a soutenu sa thèse le 19 décembre 2002 sous la direction de Klaus Frahm, sous le titre « Effets des interactions sur les systèmes 2d désordonnés ». Il est actuellement enseignant dans

un lycée.

- Nicolas Laflorencie a soutenu sa thèse le 5 juillet 2004 sous la direction de Klaus Frahm et Didier Poilblanc, sous le titre « Influence des impuretés et du désordre dans des systèmes magnétiques de basse dimensionnalité ». Il est actuellement postdoc à l'Université de Colombie Britannique, Canada.
- Benjamin Lévi a soutenu sa thèse le 9 novembre 2004 sous la direction de B. Georgeot et D. Shepelyansky, sous le titre « Simulation de systèmes quantiques sur un ordinateur quantique réaliste ». Il est actuellement postdoc au MIT, Cambridge, USA.
- Andrei Poméransky a soutenu sa thèse le 22 octobre 2004 sous la direction de D. Shepelyansky et B. Georgeot, sous le titre « Intrication et imperfections dans le calcul quantique ». Il était financé par un contrat avec le gouvernement américain. Il est actuellement chercheur à Novossibirsk, Russie.
- Marcello Terraneo a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe d'octobre 2001 à octobre 2003, financé par le contrat européen RTN « QTRANS ». Il travaille actuellement dans une banque en Italie.
- Stefano Bettelli a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe d'avril 2002 à octobre 2003, financé par le contrat européen RTN « QTRANS ».
- Jae-Won Lee a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe de janvier 2003 à janvier 2005, financé par le contrat européen « EDIQIP ». Il est actuellement postdoc au Korean Institute for Advanced Studies, Seoul, Corée.
- José Lages a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe d'octobre 2004 à septembre 2005, financé par le contrat européen « EDIQIP ». Il est Maître de Conférences à l'Université de Besançon depuis octobre 2005.
- Olivier Giraud a effectué un séjour postdoctoral dans le groupe de septembre 2004 à septembre 2005, financé par un contrat postdoc CNRS de deux ans. Il est CR2 au CNRS dans notre équipe depuis octobre 2005.
- La thèse de Giampaolo Cristadoro (Univ. dell'Insubria, Como, Italie), soutenue en février 2005 a porté en partie sur l'effet de ratchet sur un réseau de semi-disques de Galton, correspondant à la publication [163]. Giampaolo Cristadoro a effectué un séjour de 4 mois dans notre équipe dans le cadre d'un accord entre l'Université Paul Sabatier et l'Université de Côme.
- Des séjours de longues durées dans le groupe ont été effectués par O. Zhironov (Institute of Nuclear Physics, Novossibirsk)(8 mois), G. Benenti (4 mois), D. Averin (1 mois), T. Prosen (1 mois).

2.3.9 Prospective

L'équipe envisage de poursuivre dans la direction générale des principaux thèmes de recherche décrits ci-dessus, centrés sur l'étude des effets de l'interaction et du désordre sur le transport quantique, l'effet des imperfections sur le calcul quantique, la conception et l'optimisation d'algorithmes quantiques, et le chaos quantique dissipatif.

Le travail sur l'ordinateur quantique doit être poursuivi par l'étude plus approfondie des différents types d'erreurs, unitaires ou non-unitaires, en particulier les imperfections statiques et 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. Notre équipe s'est rapprochée d'un certain nombre de groupes expérimentaux de premier plan travaillant en Europe sur l'une des implémentations les plus prometteuses, le qubit supraconducteur, et nous pensons orienter nos efforts sur ce système particulier.

Un autre type de travail très important est l'élaboration de nouveaux algorithmes quantiques, et l'optimisation de ces algorithmes pour des systèmes de petite taille. En effet, les implémentations expérimentales ne dépassent pas actuellement quelques qubits, et il est important de proposer aux expérimentateurs des algorithmes simples qu'ils pourraient implémenter. Les systèmes présentant du chaos quantique sont de bons candidats, car ils sont décrits par des équations très simples mais leur dynamique peut néanmoins être complexe. Le groupe de D. Cory au MIT (Cambridge, USA) a déjà implémenté une application chaotique sur trois qubits en utilisant les techniques de résonance magnétique nucléaire²⁶, et travaille actuellement à l'implémentation de l'application « sawtooth » avec l'aide d'un de nos anciens

26. Y. S. Weinstein, S. Lloyd, J. Emerson, and D. G. Cory, Phys. Rev. Lett. **89**, 157902 (2002)

étudiants, B. Lévi, qui effectue une postdoc au MIT. D'autres algorithmes devraient pouvoir être implémentés, peut-être dans d'autres réalisations expérimentales. Ceci demandera un travail à la fois sur l'algorithmique (analyse des ressources quantiques, comme intrication et interférences, analyse éventuellement numérique de l'efficacité des procédures quantiques) et sur la transcription des algorithmes en une succession d'opérations réalisables sur une implémentation donnée.

Notre équipe s'implique également dans la structuration de cette activité au niveau français et international; elle co-organisera en particulier un trimestre à l'Institut Henri Poincaré (4 janvier-7 avril 2006) « Quantum information, computation and complexity », qui réunira à Paris de nombreux chercheurs de premier plan dans le domaine.

Enfin, nous pensons poursuivre dans la voie de l'étude du chaos quantique dissipatif et de l'effet cliquet. Des contacts ont été pris avec des expérimentateurs en physique du solide et optique, et nous pensons que ce sujet nouveau devrait mener à des résultats importants ces prochaines années. En particulier, les interactions avec les expérimentateurs sont appelées à se développer, des expériences étant en cours pour étudier ces effets à Grenoble (J.-C.Portal), Novossibirsk (Z.D.Kvon) et New-York (S.Vitkalov).

2.4 Dynamique non linéaire des systèmes de fermions finis

Équipe (permanents):

- **M. Belkacem** (Maître de conférences, recruté en 2000, en disponibilité depuis sept. 2005)
- **P. M. Dinh** (Maître de conférences, recrutée en 2003)
- **E. Suraud** (Professeur, recruté en 1992)

Durant ces 4 dernières années, l'équipe «Agrégats» a poursuivi le développement du programme de recherche portant sur la réponse électronique et ionique des édifices atomiques, notamment des agrégats métalliques et a mis en chantier deux nouveaux axes de recherches: l'étude des agrégats en matrice et, très récemment, celle des agrégats et molécules d'intérêt biologique sous irradiation. Après la mise au point des outils théoriques et numériques dans la deuxième moitié des années 1990, notre équipe a étudié un grand nombre d'applications à divers domaines de dynamique des agrégats, en relation avec les nombreux développements expérimentaux dans le domaine. La mise en service de lasers de haute intensité et délivrant des pulses de l'ordre de la femtoseconde a joué un rôle important dans ces développements et une part importante de ces travaux a été axée en direction de ces expériences. Les méthodes traditionnelles de chimie quantique et de physique moléculaire ont encore peu permis d'aborder ces questions et les méthodes de champ moyen effectif fondées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité utilisées ici, représentent un outil puissant et robuste.

Parallèlement à ces travaux, l'exploration de méthodes théoriques adaptées à la dynamique des systèmes de fermions finis (agrégats, noyaux,...) a été poursuivie. Ce 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.

Le renforcement de l'équipe avec l'arrivée en 2002 de P. M. Dinh et son recrutement en 2003 a permis de développer notre activité dans des voies nouvelles, peu explorées pour nous jusqu'ici. Cependant l'équipe se trouve diminuée depuis sept. 2005 par la mise en disponibilité (pour trois ans) de M. Belkacem.

Enfin la collaboration avec le professeur. P.-G. Reinhard de l'Université d'Erlangen, entamée dans les années 1990, s'est poursuivie ces quatre dernières années de façon très fructueuse. Plusieurs thèses ont été soutenues dans le cadre de cette activité et, à plusieurs reprises, des échanges d'étudiants pour des séjours de plusieurs mois ont eu lieu.

2.4.1 Axes de recherche et perspectives

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. Suraud);
- 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, puis E. Suraud);

- 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 quatre dernières années.

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 compte tenu de leur fort impact expérimental.

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 envisagés.

Par ailleurs, en complément des informations apportées par la modèle nanoplasma, nous avons développé un modèle microscopique basé sur la dynamique moléculaire. Cette description nous permet de vérifier certaines hypothèses utilisées dans le modèle nanoplasma comme l'homogénéité du système, la thermalisation instantanée, etc. Une description microscopique donne 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 confrontation à l'expérience. Les premiers résultats de ce modèle microscopique sont en cours de publication, et ont fait l'objet d'une thèse récente.

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. Nous avons donc entrepris de considérer ces questions en détail. Par ailleurs, disposer d'un modèle de matrice polarisable nous a permis 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.

Les recherches menées sur les agrégats en matrice nous ont conduit à développer une approche «hiérarchique» du problème, avec une description microscopique détaillée de l'agrégat et une description phénoménologique de l'environnement (en l'occurrence une matrice polarisable). Dans cet esprit, nous nous sommes attaqués à l'extension de telles méthodes hiérarchiques à d'autres systèmes, notamment des agrégats d'intérêt biologique, typiquement en solution aqueuse. Il s'agit d'un sujet difficile mais pour lequel existent de nombreux travaux sur lesquels nous pouvons nous appuyer. L'objectif à terme consiste à nouveau à étudier la dynamique, au niveau microscopique, de tels objets soumis à des perturbations

électromagnétiques (irradiation laser, collision ionique). Ce projet devrait focaliser une part importante de nos efforts, en parallèle avec les travaux sur les agrégats en matrice présentés ci-dessus, durant les prochaines années.

2.4.2 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.

Un autre programme PROCOPE a été initié au début 2004 par M. Belkacem et G. Zwicknagel (Univ. Erlangen, Allemagne) et se poursuit jusqu'à la fin 2005.

Le prof. P. G. Reinhard bénéficie d'un Séjour Scientifique de Haut Niveau de 4 mois au laboratoire, à partir de septembre 2005 et a reçu le titre de Docteur Honoris Causa de l'université Paul Sabatier en 2005.

Encadrement de thèses

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

- «Dynamique dans les agrégats métalliques violemment excités : approche semiclassique», 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. Andrae, thèse soutenue en 2003, Université d'Erlangen.
- «On electron dissipation in embedded metal clusters», M. Mundt, Diplomarbeit soutenue en juin 2004, Université d'Erlangen.
- «Extension du champ moyen dépendant du temps pour la dynamique d'agrégats en champ laser intense», M. Ma, thèse soutenue en mars 2004, Université de Toulouse.
- «Etude théorique d'agrégats soumis à des champs laser intenses», F. Mégi, thèse soutenue en juin 2005, Université de Toulouse.
- «Dynamics of embedded metal clusters», F. Fehrer, thèse prévue début 2006, Université d'Erlangen.
- «Dynamique d'agrégats en matrice et déposés» G. Bousquet, thèse débutée en octobre 2004, Université de Toulouse.

Ecriture d'ouvrages scientifiques

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

P. M. Dinh et E. Surauud, en collaboration avec J. Navarro (Univ. Valence, Espagne) ont soumis en 2005 le manuscrit d'un livre intitulé «Océans et gouttelettes quantiques», livre de vulgarisation sur les liquides quantiques. Ce projet de publication, soutenu par J. M. Lévy-Leblond, est en cours d'examen chez Vuibert.

Actions de diffusion de la culture scientifique

Nous menons depuis plusieurs années un travail de diffusion de la culture scientifique notamment au travers de conférences données dans les lycées²⁷ et au travers de l'organisation (participation au comité national d'organisation) des écoles d'été E2PHY²⁸. En 2005, Année Mondiale de la Physique, nous avons particulièrement investi dans cette activité, au travers des conférences mentionnées ci-dessus mais également en participant aux travaux de conception de l'affiche «Composants élémentaires» qui va être diffusée fin 2005 dans tous les lycées de France²⁹. Enfin le livre «Océans et gouttelettes quantiques», mentionné plus haut, s'inscrit également dans cette participation à l'Année Mondiale de la Physique.

27. cf. <http://institut.in2p3.fr/page/communication/grandpublic/nepal/nepalf.htm>

28. cf. <http://e2phy.in2p3.fr/>

29. cf. <http://events.lal.in2p3.fr/une/AfficheFRANWEB.jpg>

Site internet

Des informations complémentaires sur les travaux de l'équipe «Agréats» sont disponibles sur
http://www.lpt.irsamc.ups-tlse.fr/~dinh/Agregats/erl_toul_main.html

Chapitre 3

Bilan quantitatif 2002-2005

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. Arrighoni 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 Lafflorencie 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. Andreas Läuchli and Didier Poilblanc, *Spin-charge separation in two-dimensional frustrated quantum magnets*, Phys. Rev. Lett. **92**, 236404 (2004).
18. 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).
19. Nicolas Laflorencie, Didier Poilblanc and Anders Sandvik, *Magnetic ordering in a doped spin-Peierls system*, Phys. Rev. B **69**, 212412 (2004).
20. N. Laflorencie, H. Rieger, A. W. Sandvik et P. Henelius, *Crossover effects in the random exchange spin-1/2 antiferromagnetic chain*, Phys. Rev. B **70**, 054430 (2004).
21. D. Poilblanc, E. Orignac, S.R. White, S. Capponi, *Resonant magnetic mode in superconducting 2-leg ladders*, Phys. Rev. B **69**, 220406(R) (2004).
22. Didier Poilblanc, *Enhanced pairing in doped quantum magnets with frustrated hole motion*, Phys. Rev. Lett. **93**, 193204 (2004).
23. H. D. Chen, S. Capponi, F. Alet et S.C. Zhang, *Global Phase Diagram of the High Tc Cuprates*, Phys. Rev. B **70**, 024516 (2004).
24. S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini, *Numerical Contractor Renormalization Method for Quantum Spin Models*, Phys. Rev. B **70**, 104424 (2004).
25. S. Capponi, C.J. Wu et S.C. Zhang, *Current carrying ground state in a bilayer model of strongly correlated systems* Phys. Rev. B **70**, 220505(R) (2004).
26. Nicolas Laflorencie, Didier Poilblanc and Manfred Sgrist, *Critical properties of doped spin-Peierls chains*, Phys. Rev. B **71**, 212403 (2005).
27. Didier Poilblanc and D.J. Scalapino, *Gap function $\Phi(k,\omega)$ for a two-leg t-J ladder and the pairing interaction*, Phys. Rev. B **71**, 174403 (2005).
28. Didier Poilblanc, *Stability of Inhomogeneous Superstructures from Renormalized Mean-field Theory of the t-J Model*, Phys. Rev. B **72**, 060508(R) (2005).
29. Didier Poilblanc, Andreas Laeuchli, Matthieu Mambrini, Frédéric Mila, *Spinon confinement around a vacancy in frustrated quantum antiferromagnets*, cond-mat/0506810 (soumis à PRL).
30. G. Roux, S.R. White, S. Capponi, A. Läuchli, D. Poilblanc, *Doped two-leg ladder with ring exchange: Exact diagonalization and density matrix renormalization group computations*, Phys. Rev. B **72**, 014523 (2005).
31. G. Misguich, C. Lhuillier, M. Mambrini and P. Sindzingre, *Degeneracy of the ground-state of antiferromagnetic spin-1/2 Hamiltonians*, Eur. Phys. J B **26**, 167 (2002).
32. J.-B. Fouet, M. Mambrini, P. Sindzingre and C. Lhuillier, *Planar pyrochlore: A valence bond crystal*, Phys. Rev. B **67**, 054411 (2003).
33. 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).
34. S. Dommange, M. Mambrini, B. Normand and F. Mila, *Static impurities in the kagome lattice: dimer freezing and mutual repulsion*, Phys. Rev. B **68**, 224416 (2003).
35. A. Läuchli, C. Honerkamp and T.M. Rice, *d-Mott phases in one and two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **92**, 037006 (2004).
36. 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

37. P.-H. Chavanis, *Gravitational instability of finite isothermal spheres*, A&A **381**, 340 (2002).
38. P.-H. Chavanis, *Gravitational instability of finite isothermal spheres in general relativity. Analogy with neutron stars*, A&A **381**, 709 (2002).
39. P.-H. Chavanis, *Gravitational instability of polytropic spheres and generalized thermodynamics* A&A **386**, 732 (2002).
40. P.-H. Chavanis & J. Sommeria, *Statistical mechanics of the shallow water system*, Phys. Rev. E **65**, 026302 (2002).
41. P.-H. Chavanis, *Effective velocity created by a point vortex in two-dimensional hydrodynamics* Phys. Rev. E **65**, 056302 (2002).
42. P.-H. Chavanis, *Phase transitions in self-gravitating systems. Self-gravitating fermions and hard spheres models*, Phys. Rev. E **65**, 056123 (2002).

43. P.-H. Chavanis, C. Rosier & C. Sire, *Thermodynamics of self-gravitating systems*, Phys. Rev. E **66**, 036105 (2002).
44. P.-H. Chavanis, *Gravitational instability of slowly rotating isothermal spheres*, A&A **396**, 315 (2002).
45. C. Sire & P.H. Chavanis, *Thermodynamics and collapse of self-gravitating Brownian particles in D dimensions*, Phys. Rev. E **66**, 046133 (2002).
46. P.-H. Chavanis & S. Ispolatov, *Phase diagram of self-attracting systems*, Phys. Rev. E **66**, 036109 (2002).
47. C. Sire, *A precise approximation for directed percolation in $d = 1 + 1$* , Phys. Rev. E **66**, 066128 (2002).
48. 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).
49. N. Destainville, *Flip dynamics in octagonal rhombus tiling sets*, Phys. Rev. Lett. **88**, 30601 (2002).
50. S.N. Majumdar and P.L. Krapivsky, *Extreme Value Statistics and Traveling Fronts: An Application to Computer Science*, Phys. Rev. E. **65**, 036127 (2002).
51. S.N. Majumdar, *Statistics of Multiple Sign Changes in a Discrete Non-Markovian Sequence*, Phys. Rev. E. Rapid Communications **65**, 035104 (R) (2002).
52. 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).
53. S.N. Majumdar and D.S. Dean, *Exact Solution of a Drop-push Model for Percolation*, Phys. Rev. Lett., **89**, 115701 (2002).
54. 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).
55. 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).
56. 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).
57. 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).
58. S.N. Majumdar and A. Comtet, *Exact Asymptotic Results for Persistence in the Sinai Model with Arbitrary Drift*, Phys. Rev. E **66**, 061105 (2002).
59. 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).
60. 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).
61. D.S. Dean, *Approximation scheme for the density of states of the Laplacian on random graphs*, J. Phys. A. **35**, L153 (2002).
62. 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).
63. D.S. Dean and F. Ritort, *The squared interaction matrix Sherrington-Kirkpatrick Model*, Phys. Rev. B. **65**, 224209 (2002).
64. 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).
65. D.S. Dean and R.R. Horgan, *Electrostatic fluctuations in soap Films*, Phys. Rev. E **65**, 061603, (2002).
66. F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez, D.S. Dean and L. Salomé, *Confined diffusion without fences of a G protein coupled receptor as revealed by single particle tracking*, Biophys J. **84**, 356 (2003).
67. R. Cherrier, D.S. Dean and A. Lefèvre, *The statics of generalized random orthogonal model spin glasses*, Phys. Rev. E **67**, 046112 (2003).
68. R. Cherrier, D.S. Dean and A. Lefèvre, *The number of metastable states in generalized random orthogonal model*, J. Phys. A **36**, 3935 (2003).
69. D.S. Dean and A. Lefèvre, *A possible test of the thermodynamic approach to granular media*, Phys. Rev. Lett. **90**, 198301 (2003).

70. D.S. Dean and R.R. Horgan, *Weak non-linear surface charging effects in electrolytic films*, Phys. Rev. E **68**, 051104 (2003).
71. D.S. Dean and R.R. Horgan, *The field theoretic derivation of the contact value theorem and its modification by the Casimir effect*, Phys. Rev. E **68**, 061106 (2003).
72. D.S. Dean I.T. Drummond and R.R. Horgan, *Effective diffusion constant in a two dimensional medium of charged point scatterers*, J. Phys. A. **37**, 2039 (2004).
73. D.S. Dean and R.R. Horgan, *Field theoretic calculation of the surface tension for a model electrolyte system*, Phys. Rev. E **69**, 061603 (2004).
74. D.S. Dean and A. Lefèvre, *Self diffusion in a system of interacting Langevin particles* Phys. Rev. E **69**, 061111 (2004).
75. D.S. Dean and R.R. Horgan, *The two loop calculation of the disjoining pressure of a symmetric electrolyte soap film*, Phys. Rev. E, **69** 061603 (2004).
76. D.S. Dean, I.T. Drummond, R.R. Horgan and A. Lefèvre, *Perturbation theory for the effective diffusion constant in a medium of random scatterers*, J. Phys. A. **37**, 10459 (2004).
77. D.S. Dean, D.J. Lancaster and S.N. Majumdar, *The statistical mechanics of traveling salesman type problems*, J. Stat. Mech. L01001 (2005).
78. D.S. Dean, I.T. Drummond, R.R. Horgan and S.N. Majumdar, *Equilibrium statistics of a slave estimator in Langevin processes* Phys. Rev. E. **70**, 011101, (2005).
79. D.S. Dean and R.R. Horgan, *The thermal Casimir effect in lipid bilayer tubules*, Phys. Rev. E **71**, 041907 (2005).
80. D.S. Dean and R.R. Horgan, *The field theory of symmetrical layered electrolytic systems and the thermal Casimir effect*, J. Phys. C. **17**, 3473 (2005).
81. D.S. Dean, D. Lancaster and S.N. Majumdar, *The statistical mechanics of combinatorial optimization problems with site disorder*, Phys. Rev. E **72**, 026125 (2005).
82. F. Dumas, 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).
83. N. Destainville, R. Mosseri, F. Bailly, *A formula for the number of tilings of an octagon by rhombi*, Theor. Comp. Sc. **319**, 356 (2003).
84. N. Destainville, *Bounding spectral gaps of Markov chains: a novel exact multi-decomposition technique*, J. Phys. A: Math. Gen. **36**, 3647 (2003).
85. V. Desoutter, N. Destainville, *Slow dynamics due to entropic barriers in the one-dimensional « descent model »*, soumis à Eur. Phys. J. B **37**, 383 (2004).
86. J. Vidal, N. Destainville, R. Mosseri, *Quantum dynamics in high codimension tilings: from quasi-periodicity to disorder*, Phys. Rev. B **68**, 172202 (2003).
87. V. Desoutter, N. Destainville, *Flip dynamics in three-dimensional random tilings*, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 17 (2005).
88. N. Destainville, M. Widom, R. Mosseri, F. Bailly, *Random tilings of high symmetry: I. Mean-field theory*, à paraître dans J. Stat. Phys. (2005).
89. M. Widom, N. Destainville, R. Mosseri, F. Bailly, *Random tilings of high symmetry: II. Monte Carlo simulation*, à paraître dans J. Stat. Phys. (2005).
90. N. Meilhac, L. Le Guyader, L. Salomé, N. Destainville, *Detection of confinement and jumps in single protein membrane trajectories*, soumis à Phys. Rev. Lett. (2005).
91. N. Destainville, L. Salomé, *Quantification and correction of systematic errors due to detector time-averaging in single molecule tracking experiments*, soumis Biophys. J. Letters (2005).
92. M. Manghi, X. Schlagberger, R.R. Netz *Propulsion with a rotating elastic nano-rod* soumis à Phys. Rev. Lett. (2005).
93. C. Sire, P.-H. Chavanis, *Post-collapse dynamics of self-gravitating Brownian particles*, Phys. Rev. E **69**, 066109 (2004).
94. C. Sire, *Autocorrelation exponent of conserved spin systems in the scaling regime following a critical quench*, Phys. Rev. Lett. **93**, 130602 (2004).
95. P.-H. Chavanis, C. Sire, *Virial Theorem and dynamical stability of self-gravitating Brownian particles and bacterial populations I.*, soumis à Phys. Rev. E (2005).
96. P.-H. Chavanis, C. Sire, *Virial Theorem and dynamical stability of self-gravitating Brownian particles and bacterial populations II.*, soumis à Phys. Rev. E (2005).

97. P.-H. Chavanis, *Gravitational instability of isothermal and polytropic spheres*, A&A **401**, 15 (2003).
98. P.-H. Chavanis, *Generalized thermodynamics and Fokker-Planck equations. Applications to stellar dynamics and two-dimensional turbulence*, Phys. Rev. E **68**, 036108 (2003).
99. P.-H. Chavanis & M. Rieutord, *Statistical mechanics and phase diagrams of rotating self-gravitating fermions*, A&A **412**, 1 (2003).
100. P.-H. Chavanis & C. Sire, *Anomalous diffusion and collapse of self-gravitating Langevin particles in D dimensions*, Phys. Rev. E **69**, 016116 (2004).
101. P.-H. Chavanis *Generalized thermodynamics and kinetic equations: Boltzmann, Landau, Kramers and Smoluchowski*, Physica A **332**, 89 (2003).
102. P.-H. Chavanis, P. Laurencot & M. Lemou, *Chapman-Enskog derivation of the generalized Smoluchowski equation*, Physica A **341**, 145 (2004).
103. P.-H. Chavanis & C. Sire, *Estimate of blow-up and relaxation time for self-gravitating Brownian particles and bacterial populations*, Phys. Rev. E **70**, 026115 (2004).
104. P.-H. Chavanis, *Generalized kinetic equations and effective thermodynamics*, Banach Center Publ. **66**, 79 (2004).
105. P.-H. Chavanis, M. Ribot, C. Rosier & C. Sire, *On the analogy between self-gravitating Brownian particles and bacterial populations*, Banach Center Publ. **66**, 103 (2004).
106. C. Sire & P.-H. Chavanis, *Gravitational collapse of a Brownian gas*, Banach Center Publ. **66**, 287 (2004).
107. P.-H. Chavanis, *Statistical mechanics and thermodynamic limit of self-gravitating fermions in D dimensions*, Phys. Rev. E **69**, 6126 (2004).
108. P.-H. Chavanis, *Generalized Fokker-Planck equations and effective thermodynamics*, Physica A **340**, 57 (2004).
109. P.-H. Chavanis, *Statistical mechanics of geophysical turbulence: application to jovian flows and Jupiter's great red spot*, Physica D **200**, 257 (2005).
110. P.-H. Chavanis, *On the lifetime of metastable states in self-gravitating systems*, A&A **432**, 117 (2005).
111. P.-H. Chavanis & F. Bouchet, *On the coarse-grained evolution of collisionless stellar systems*, A&A **430**, 771 (2005).
112. N. Leprovost, B. Dubrulle & P.-H. Chavanis, *Thermodynamics of MHD flows with axial symmetry*, Phys. Rev. E **71**, 036311 (2005).
113. P.-H. Chavanis & C. Sire, *On the interpretations of Tsallis functional in connection with Vlasov-Poisson and related systems: Dynamics vs thermodynamics*, Physica A **356**, 419 (2005).
114. P.-H. Chavanis, J. Vatteville & F. Bouchet, *Dynamics and thermodynamics of a simple model similar to self-gravitating systems: the HMF model*, Eur. Phys. J. B **46**, 61 (2005).
115. J. Sopik, C. Sire & P.-H. Chavanis, *Self-gravitating Brownian systems and bacterial populations with two or more types of particles*, Phys. Rev. E **72**, 026105 (2005).
116. P.-H. Chavanis, *Hamiltonian and Brownian systems with long-range interactions: I. Statistical equilibrium states and correlation functions*, Physica A, in press (2005).
117. P.-H. Chavanis, *Hamiltonian and Brownian systems with long-range interactions: II. Kinetic equations and stability analysis*, Physica A, in press (2005).
118. P.-H. Chavanis, *Coarse-grained distributions and superstatistics*, Physica A, in press (2005).
119. S.N. Majumdar and P.L. Krapivsky, *Extreme Value Statistics and Traveling Fronts: Various Applications*, Physica A **318**, 161 (2003).
120. 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).
121. S.N. Majumdar and A.J. Bray, *Persistence of Manifolds in Nonequilibrium Critical Dynamics*, Phys. Rev. Lett. **91**, 030602 (2003).
122. 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).
123. S.N. Majumdar and A.J. Bray, *Survival Probability of a Ballistic Tracer Particle in the Presence of Diffusing Traps*, Phys. Rev. E Rapid Communications **68**, 045101 (2003).
124. S.N. Majumdar, *Persistence of a Particle in the Matheron-de Marsily Velocity Field*, Phys. Rev. E Rapid Communications **68**, 050101 (2003).

125. 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*, Phys. Rev. E **69**, 016106 (2004).
126. C. Dasgupta, M. Constatin, S. Das Sarma, and S.N. Majumdar, *Survival in equilibrium step Fluctuations*, Phys. Rev. E **69**, 022101 (2004).
127. S.N. Majumdar and S. Nechaev, *An Anisotropic Ballistic Deposition Model with Links to the Ulam Problem and the Tracy-Widom Distribution*, Phys. Rev. E **69**, 011103 (2004).
128. S.N. Majumdar and A. Comtet, *Exact Maximal Height Distribution of Fluctuating Interfaces*, Phys. Rev. Lett. **92**, 225501 (2004).
129. M. Constantin, C. Dasgupta, P. Punyindu Chatraphorn, S.N. Majumdar and S. Das Sarma, *Persistence in Nonequilibrium Surface Growth*, Phys. Rev. E **69**, 061608 (2004).
130. S.N. Majumdar, D. Das, J. Kondev and B. Chakraborty, *Landau-like Theory of Glassy Dynamics*, Phys. Rev. E **70**, 060501 (2004).
131. M.R. Evans, S.N. Majumdar, and R.K.P. Zia, *Factorised Steady States in Mass Transport Models*, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, L275 (2004).
132. R.K.P. Zia, M.R. Evans and S.N. Majumdar, *Construction of the Factorized Steady State Distribution in Models of Mass Transport*, J. Stat. Mech.: Theo. Exp. L10001 (2004).

Cohérence quantique & Information quantique

133. B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computer inverting time arrow for macroscopic systems*, Eur. Phys. J. D **19**, 263 (2002).
134. 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**, 219802 (2002).
135. 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**, 026220 (2002).
136. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, *Eigenstates of operating quantum computer: hypersensitivity to static imperfections*, Eur. Phys. J. D **20**, 293 (2002).
137. 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**,054301 (2002).
138. 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. **89**, 239402 (2002).
139. 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**, 172506 (2002).
140. M. Rieutord, L. Valdettaro and B. Georgeot, *Analysis of singular inertial modes in a spherical shell: the slender toroidal shell model*, J. of Fluid Mech. **463**, 345 (2002).
141. M.Terraneo, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Strange attractor simulated on a quantum computer*, Eur. Phys. J. D **22**, 127 (2003).
142. 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**, 285 (2003).
143. G.Benenti, G.Casati, S.Montangero and D.L.Shepelyansky, *Dynamical localization simulated on a few qubits quantum computer*, Phys. Rev. A **67**, 052312 (2003).
144. O.V.Zhironov, 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**, 056209 (2003).
145. B.Levi, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computing of quantum chaos in the kicked rotator model*, Phys. Rev. E **67**, 046220 (2003).
146. S.Bettelli and D.L.Shepelyansky, *Entanglement versus relaxation and decoherence in a quantum algorithm for quantum chaos*, Phys. Rev. A **67**, 054303 (2003).
147. 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**, 205112 (2003).
148. S.Bettelli, L. Serafini, T. Calarco , *Toward an architecture for quantum programming*, Eur. Phys. J. D, **25**, 181 (2003).

149. M.Terraneo and D.L.Shepelyansky, *Imperfection effects for multiple applications of the quantum wavelet transform*, Phys. Rev. Lett. **90**, 257902 (2003).
150. A.A.Pomeransky, *Strong superadditivity of the entanglement of formation follows from its additivity*, Phys. Rev. A **68**, 032317 (2003).
151. A.A.Pomeransky and D.L.Shepelyansky, *Quantum computation of the Anderson transition in presence of imperfections*, Phys. Rev. A **69**, 014302 (2004).
152. B.Georgeot et D.L.Shepelyansky, *Les ordinateurs quantiques affrontent le chaos*, Images de la physique 2003-2004, 17 (2004).
153. M.Terraneo and D.L.Shepelyansky, *Dynamical localization and repeated measurements in a quantum computation process*, Phys. Rev. Lett. **92**, 037902 (2004).
154. K.M.Frahm, R.Fleckinger and D.L.Shepelyansky, *Quantum chaos and random matrix theory for fidelity decay in quantum computations with static imperfections*, Eur. Phys. J. D **29**, 139 (2004) [highlight paper of the issue].
155. B.Georgeot, *Quantum computing of Poincare recurrences and periodic orbits*, Phys. Rev. A **69**, 032301 (2004).
156. S.Bettelli, *A quantitative model for the effective decoherence of a quantum computer with imperfect unitary operations*, Phys. Rev. A **69**, 042310 (2004).
157. A.Stotland, A.A.Pomeransky, E.Bachmat and D.Cohen, *The information entropy of quantum mechanical states*, Europhys. Lett. **67**, 700 (2004).
158. B. Levi and B.Georgeot, *Quantum Computation of a Complex System: the Kicked Harper Model*, Physical Review E **70**, 056218 (2004).
159. A.D.Chepelianskii and D.L.Shepelyansky, *Directing transport by polarized radiation in the presence of chaos and dissipation*, Phys. Rev. B **71**, 052508 (2005).
160. A.A.Pomeransky, O.V.Zhirov and D.L.Shepelyansky, *Phase diagram for the Grover algorithm with static imperfections*, Eur. Phys. J. D **31**, 131 (2004).
161. G.G.Carlo, G.Benenti, G.Casati and D.L.Shepelyansky, *Quantum ratchets in dissipative chaotic systems*, Phys. Rev. Lett. **94**, 164101 (2005).
162. O.Kern, G.Alber and D.L.Shepelyansky, *Quantum error correction of coherent errors by randomization*, Eur. Phys. J. D **32**, 153 (2005).
163. G.Cristadoro and D.L.Shepelyansky, *Nonequilibrium stationary states with ratchet effect*, Phys. Rev. E **71**, 036111 (2005).
164. T.Prosen and D.L.Shepelyansky, *Mesoscopic « Rydberg » atom in a microwave field* (cond-mat/0411155) or *Microwave control of transport through a chaotic mesoscopic dot* Eur. Phys. J. B **46**, 515 (2005).
165. M.Terraneo, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computation and analysis of Wigner and Husimi functions: toward a quantum image treatment*, Phys. Rev. E **71**, 066215 (2005).
166. J.W.Lee and D.L.Shepelyansky, *Quantum chaos algorithms and dissipative decoherence with quantum trajectories*, Phys. Rev. E, **71**, 056202 (2005).
167. J.W.Lee, D.V.Averin, G.Benenti and D.L.Shepelyansky, *Model of a deterministic detector and dynamical decoherence*, Phys. Rev. A **72**, 012310 (2005).
168. O.Giraud, B.Georgeot and D.L.Shepelyansky, *Quantum computing of delocalization in small-world networks*, Physical Review E **72**, 036203 (2005).
169. O. Giraud, *Periodic orbits and semiclassical form factor in barrier billiards* Commun. Math. Phys. **260**, 183 (2005).
170. O. Giraud, *Finite geometries and diffractive orbits in isospectral billiards*, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, L477 (2005).
171. O. Giraud and B.Georgeot, *Intermediate quantum maps for quantum computation*, to appear in Physical Review A (quant-ph/0504230 preprint).
172. G.Carlo, G.Benenti and D.L.Shepelyansky, *Dissipative quantum chaos: transition from wave packet collapse to explosion*, to appear in Phys. Rev. Lett. (quant-ph/0503081).
173. O.V.Zhirov and D.L.Shepelyansky, *Quantum synchronization*, submitted to Phys. Rev. Lett. (cond-mat/0507029).
174. D.Braun, *Entanglement from the cosmic microwave background*, to appear in Phys. Rev. A (quant-ph/0505082).

Agrégats

175. 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.
176. E. Giglio, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Semiclassical description of ionic and electronic dynamics in metal clusters*, Ann. Phys. (Leipzig) **11** (2002) 291.
177. C. Legrand, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Comparison of self interaction corrections for metal clusters*, J. Phys. B **35** (2002) 1115-1128.
178. 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.
179. T. Berkus, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Dynamical effects in the optical response of small carbon chains*, Int. J. Mol. Sc. **3** (2002) 69-75.
180. 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.
181. P.-G. Reinhard and E. Suraud *DFT studies of ionic vibrations in Na clusters*, Eur. Phys. J. D **21** (2002) 315.
182. 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].
183. N. Borghini, P.M. Dinh, J.Y. Ollitrault, A.M. Poskanzer and S.A. Voloshin, *Effects of momentum conservation on the analysis of anisotropic flow*, Phys. Rev. C **66** (2002) 014901.
184. N. Borghini, P.M. Dinh and J.Y. Ollitrault, *Analysis of directed flow from elliptic flow*, Phys. Rev. C **66** (2002) 014905.
185. 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].
186. 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.
187. 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.
188. P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Metal clusters in strong fields*, Nucl. Inst. Methods B **209** (2003) 41.
189. E. Giglio, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Influence of the dynamical correlations on the ionization of highly irradiated metal clusters*, Nucl. Inst. Methods B **205** (2003) 350.
190. A. Ipatov, E. Suraud, and P. G. Reinhard *A microscopic study of sodium cluster deposition on an insulating surface*, Int. J. Mol. Sci. **4** (2003) 301.
191. A. Pohl, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Photoelectron spectra from K and Na clusters*, Phys. Rev. A **68** (2003) 053202.
192. 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.
193. K. Andrae, M. Belkacem, P. M. Dinh, E. Giglio, M. Ma, A. Pohl, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Metal cluster dynamics*, Lecture Notes in Physics, Springer; édité par K. Morawetz, 2003.
194. A. Ipatov, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Velocity dependence of metal cluster deposition on an insulating surface*, Eur. Phys. J. D **30** (2004) 65.
195. P. G. Reinhard and E. Suraud, *Metal clusters dynamics*, « Encyclopedia of Nanosciences », Am. Scien. Publish; édité par H. S. Nalwa, 2004.
196. M. Belkacem, A. Bouchene, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Photodynamics of clusters*, « Encyclopedia of Nanosciences », Am. Scien. Publish; édité par H. S. Nalwa, 2004.
197. K. Andrea, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Cross beams pump and probe dynamics in metal clusters*, Phys. Rev. Lett. **92** (2004) 173402-173406.
198. A. Pohl, P.-G. Reinhard, E. Suraud *Exponential Photoelectron spectra in Na clusters*, J. Phys. B **37** (2004) 3301.
199. A. Pohl, P.-G. Reinhard, E. Suraud *Angular distribution of electrons emitted from Na clusters*, Phys. Rev. A **70** (2004) 023202.
200. B. Gervais, E. Giglio, E. Jaquet, A. Ipatov and P.-G. Reinhard, F. Fehrer and E. Suraud, *Spectroscopic properties of Na clusters embedded in a rare-gas matrix*, Phys. Rev. A **71** (2004) 015201.

201. B. Gervais, E. Giglio, E. Jacquet, A. Ipatov, P.-G. Reinhard, and E. Suraud, *Simple DFT model of clusters embedded in rare gas matrix: trapping sites and spectroscopic properties of Na embedded in Ar*, J. Chem. Phys. **121** (2004) 8466 .
202. P. M. Dinh, P. G. Reinhard and E. Suraud, *Time resolved fission in metal clusters*, J. Phys. B **38** (2005) 1637-1643 .
203. E. Suraud, P.-G. Reinhard *Vlasov dynamics in finite fermion systems*, Transport Theory and Statistical Physics, sous presse 2005.
204. K. Andrae, P.M. Dinh, P.-G. Reinhard, and E. Suraud *Pump and probe analysis of metal cluster dynamics*, J. Comp. Mat. Sci., 2005, sous presse
205. M. Ma, P.-G. Reinhard, and E. Suraud *Dynamics of H_9^+ in intense laser pulses*, Eur. Phys. Journ. **D 33** (2005) 49
206. F. Fehrer, P.-G. Reinhard, E. Suraud, E. Giglio, B. Gervais and A. Ipatov, *Linear and non-linear response of embedded Na clusters* Appl. Phys. **A** (2005) sous presse
207. P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Dynamics of orientations in an ensemble of Na_7^+ clusters* Euro. J. Phys. **D 34** (2005) 145.
208. F. Fehrer, M. Mundt, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Modeling Na clusters in Ar matrices*, Ann. Phys. (Leipzig) **14** (2005) 411.
209. F. Fehrer, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Coupled plasmon and phonon dynamics in embedded Na clusters* Appl. Phys. **A** (2005) sous presse.

3.2 Actes de colloques

Fermions fortement corrélés

210. Samuel Wehrli, Didier Poilblanc, Maurice Rice, and Manfred Sigrist, *Electronic Structure and Charge Distribution in the C60-FET*, AIP Conf. Proc. 633(1) 213 (14 Oct 2002).
211. 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).
212. 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.
213. 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 **346**, 6-10 (2004).
214. 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.
215. C. Lavallo, M. Arikawa, S. Capponi et A. Muramatsu, *Quantum Monte Carlo Studies of Correlated Systems*, Proceedings of NIC Symposium 2004, NIC Series, Vol. **20**, ISBN 3-00-012372-5, 281 (2003).
216. 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, « *Lecture notes in Physics* », Vol. 645, p.227, Ed. U. Schollwöck et al., Springer (2004).
217. Nicolas Laflorencie, Didier Poilblanc, *Confinement and critical regime in doped frustrated quasi-one dimensional magnets*, **Invited paper** at SPQS, Sendai July 2004.
218. S. Capponi, H.D. Chen, F. Alet et S.C. Zhang, *Effective Hamiltonian for cuprates: Global phase diagram*, Condensed Matter Theories, Volume 19, (éditeurs: M. Belkacem et P.M. Dinh), Nova Science Publishers (2005).

Physique Statistique

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

220. P.-H. Chavanis, *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, 2002) .
221. P.-H. Chavanis, *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, 2002).
222. 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).
223. D.S. Dean and A. Lefèvre, *The steady state of the tapped Ising model*, dans *Challenges in Granular Physics*, eds T. Halsey et A. Mehta, *World Scientific* (2003).
224. F. Daumas, N. Destainville, C. Millot, A. Lopez, D.S. Dean and L. Salomé *Interprotein interactions are responsible for the confined diffusion of a G-protein-coupled receptor at the cell surface*, *Biochemical Society Transactions* **31**, 1001 (2003).
225. D.S. Dean and A. Lefèvre, *A possible experimental test of the thermodynamic approach to granular media* dans *Unifying Concepts in Granular Media and Glasses*, eds M. Nicodemi et al., *Elsevier Science B.V.* (2004).
226. S.N. Majumdar, D.S. Dean and P.L. Krapivsky, *Understanding search trees via statistical physics* dans *Proceedings of the 22nd IUPAP International Conference of Statistical Physics (STAT PHYS 22)*, *Pramana* (2005).
227. 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* 334&335, 96 (2003).
228. P.-H. Chavanis, *Statistical mechanics of two-dimensional turbulence with a prior vorticity distribution* in Proceedings of the Ringberg Workshop on Interdisciplinary Aspects of Turbulence (2005).

Cohérence quantique & Information quantique

229. R.Livi, S.Ruffo and D.L.Shepelyansky, *Le cheminement de Kolmogorov de l'intégrabilité au chaos et au-delà*, in « L'héritage de Kolmogorov en physique », Eds. R.Livi et A.Vulpiani Belin, Paris (2003) et Lect. Notes Phys., Springer (2003).
230. J.W.Lee, A.D.Chepelianskii and D.L.Shepelyansky, *Treatment of sound on quantum computers*, Proceedings of ERATO Conference on Quantum Information Science 2004, Tokyo, pp. 91-92 (2004).
231. J.W.Lee, A.D.Chepelianskii and D.L.Shepelyansky, *Applications of quantum chaos to realistic quantum computations and sound treatment on quantum computers*, in « Noise and information in nanoelectronics, sensors, and standards II » Proceedings of SPIE Eds. J.M.Smulko, Y.Blanter, M.I.Dykman, L.B.Kish, v.5472, pp.246-251 (2004).
232. K.M.Frahm, R.Fleckinger and D.L.Shepelyansky, *Universal regime of fidelity decay in realistic quantum computations*, in « Quantum information and decoherence in nanosystems » Eds. D.C.Glatti, M.Sanquer, and J.T.Thanh Van, The Gioi Publ., 2004, p. 167 - 171 (Proceedings of the XXXIXth Rencontres de Moriond, 2004).
233. A.A.Pomeransky, O.V.Zhironov and D.L.Shepelyansky, *Effects of decoherence and imperfections for quantum algorithms*, Proceedings of ERATO Conference on Quantum Information Science 2004, Tokyo, pp. 171-172 (2004).
234. O.Giraud and B. Georgeot, *Quantum maps for quantum computation*, Proceedings of the ERATO conference on Quantum Information Science 2005 (Tokyo, Japon), p. 37 (2005).

Agrégats

235. 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.
236. 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, Allemagne (août 2002), p. 28 de «Progress in Nonequilibrium Green's Functions II», edts. M. Bonitz, D. Semkat, World Scientific, Singapore, 2003. Dresden, Germany, August 2002, Springer, sous presse.

237. 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.
238. 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].
239. 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].
240. K. Andrae, P.M. Dinh, P.-G. Reinhard and E. Suraud, *Pump and probe analysis of metal cluster dynamics*, 4th^{ème} Conférence Internationale sur la théorie des agrégats atomiques et moléculaires (TAMC4), Toulouse, France, 24/28 avril 2004.

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. D. Poilblanc, Workshop « Ring exchange and correlated fermions », April 12-17 2004, Cargèse, France.
10. D. Poilblanc, International Conference on Statistical Physics of Quantum Systems, « novel orders and dynamics », July 17-20, 2004, Sendai, Japan.
11. D. Poilblanc, Workshop on Computational Methods for Strongly Correlated Systems and Nanomagnetism, September 26 - October 1, 2004 Lugano, Switzerland.
12. D. Poilblanc, Yukawa International Seminar (YKIS) & Conference on « Physics of strongly correlated electron systems », November 11-19, Kyoto, Japan.
13. D. Poilblanc, Workshop « Strong Correlations and ARPES: Recent progress in theory and experiment », April 2005, Dresden, Germany.
14. D. Poilblanc, European Conference Physics of Magnetism'05, June 24-27 2005, Poznan, Poland.
15. D. Poilblanc, ICAM Advanced Workshop on: « Strongly Correlated Electrons: Diverse Examples and Unifying Themes », August 8-20, 2005, Institut Scientifique de Cargèse, Cargèse, France.
16. D. Poilblanc, ESF Exploratory Workshop on « Effective models for strongly correlated systems », Sept. 12-18 (2005), Peyresq (France) (**Organisateur**).
17. D. Poilblanc, réunion GDR NEEM, Batz-sur-Mer (2005).
18. D. Poilblanc, International Conference on « Concepts in Electron Correlations », Sept. 30-Oct. 5, 2005, Hvar (Croatia).
19. D. Poilblanc, ESF « Highly Frustrated Magnetism » Workshop, La-Londe-les-Maures, France (7 - 9 November 2005).

20. S. Capponi, International Conference CMT27 (Condensed Matter Theory), September 15-20 2003, Toulouse, France.
21. S. Capponi, *Effective Hamiltonian Approach for Strongly Correlated Systems*, Symposium en l'honneur de Jean-Paul Malrieu, Lagrasse (mai 2004).
22. S. Capponi, *Numerical Contractor Renormalization applied to strongly correlated systems*, International Workshop on Effective Models for Low-Dimensional Strongly Correlated Systems, Peyresq (septembre 2005).

Physique statistique

23. P.-H. Chavanis, Conference *Dynamics and Thermodynamics of Systems with long range Interactions*, Les Houches School (T. Dauxois), lecture (18-22/2/2002).
24. N. Destainville, *Quatrièmes Journées sur les systèmes dynamiques discrets*, Lyon, 2002.
25. N. Destainville, European Summer University *Imaging techniques in animal and human research*, Toulouse, 2003.
26. S. Majumdar, *IACM-II meeting*, Indian Institute of Science and J. Neheru Center for Advanced Studies, Bangalore, India, 2002.
27. S. Majumdar, *Statphys-Kolkata IV*, IACS (Indian Association for the Cultivation of Science) and S.N. Bose Center for Natural Sciences, Calcutta, India, 2002.
28. S. Majumdar, *Journées Sur les Graphes en Physique*, IHP, Paris, June, 2002.
29. S. Majumdar, *50 Years of Theoretical Physics*, Indian Association for the Cultivation of Science, Calcutta, India, January, 2003.
30. S. Majumdar, *Geometry and Statistics of Random Growth*, IHP, Paris, Jan-April, 2003.
31. S. Majumdar, *Arbres Aléatoires et Algorithmes*, Versailles, March, 2003.
32. S. Majumdar, *Workshop on Non-Equilibrium Systems*, Center for Nonlinear Studies (CNLS), Los Alamos National Laboratory, USA, June, 2003.
33. Majumdar, *Non-Equilibrium Statistical Physics in Low Dimensions and Reaction Diffusion Systems*, Max Planck Institute at Dresden, Germany, September 2003.
34. C. Sire, Workshop on Plastic Deformations (Mars 2002, Trieste, Italie).
35. D. Dean, *Some applications of statistical physics for searching and sorting in computer science*, Aspects of Complexity and its Applications, Rome, Italie, 2002.
36. D. Dean, *Some applications of statistical physics for searching and sorting in computer science*, Glassy States of Matter , KITP, Santa Barbara, U.S.A, (2003).
37. D. Dean, *A possible experimental test of the thermodynamic approach to granular media*, Unifying Concepts in Granular Media and Glasses, Capri, Italie (2003).
38. D. Dean, *The role of the interaction matrix in mean-field spin glass models*, Frustrated Magnetism and Slow Dynamics, Kyoto, Japon, (2004).
39. D. Dean, *Thermodynamic approaches to granular media*, Granular Physics , KITP, Santa Barbara, U.S.A, (2005).
40. D. Dean, *A physicist's perspective on optimization problems*, Stochastic Computation, Santander, Espagne (2005).
41. D. Dean, *The statistics of a slave estimator for response in Langevin systems*, Recent Progress in Glassy Physics, Paris France (2005).
42. D. Dean, *Field theoretic methods for transport in random media*, Conference in honour of Prof I.T. Drummond, Cambridge UK (2005).
43. D. Dean, *Slow dynamics and aging*, Session on Granular Matter, Institut Henri Poincaré, Paris, (2005).
44. N. Destainville, European Summer University « Imaging techniques in animal and human research », Toulouse, 2003.
45. C. Sire, Workshop on Non-linear Dynamics (Septembre 2003, Dresden, Allemagne): une conférence invitée.
46. C. Sire, Workshop on Nonlinear Elliptic and Parabolic Problems (Septembre 2003, Bedlewo, Pologne): une conférence invitée.
47. C. Sire, École sur la Cosmologie (Octobre 2004, Marseille): un cours invité.

48. P.-H. Chavanis, 2-3/6/03: Workshop *Planetary formation: toward a new scenario?*, Marseille (P. Barge), lecture (30min).
49. P.-H. Chavanis, 9-14/9/03: Conference *Nonlocal elliptic and parabolic problems*, Bedlewo (P. Biler), lecture (1h).
50. P.-H. Chavanis, 21-28/9/03: Conference *News and Expectations in Thermostatistics*, Cagliari (G. Kaniadakis), lecture (30min).
51. P.-H. Chavanis, 2-3/12/04: Conference *Interaction Particules-Turbulence*, Onera, Toulouse (K. Domelevo), lecture (1h).
52. P.-H. Chavanis, 18-22/4/05: Conference *Interdisciplinary Aspects of Turbulence*, Tegernsee (Kupka), lecture (30min).
53. P.-H. Chavanis, 28-29/6/05: Meeting *Inequivalence of Statistical Ensembles*, Firenze (S. Ruffo), lecture (30min).
54. P.-H. Chavanis, 12-19/8/05: Conference *News, Expectations and Trends in Statistical Physics (NEXT-SigmaPhi)*, Kolymbari (G. Kanaidakis), lecture (30min).

Cohérence quantique & information quantique

55. B. Georgeot, 23-27 mars 2002: conférence internationale « Semiclassical and Quantum Multibody Systems », Mathematics Research Center, Université de Warwick (Royaume-Uni).
56. D. Shepelyansky, 7 juin 2002 EC IST-FET QIPC meeting (European IST-FET program on « Quantum information processing and communications »), Brussels, Belgium.
57. D. Shepelyansky 20-22 juin 2002: QTRANS EU Mid-term review « Quantum transport on an atomic scale », Palerme, (Italie).
58. B. Georgeot, 24-28 juin 2002: conférence internationale « International workshop on chaotic transport and complexity in classical and quantum dynamics », Carry-le-Rouet (France).
59. D. Shepelyansky, 19 - 24 aout 2002, conférence internationale « Quantum computing program review » organized by ARO/NSA/ARDA, Nashville, TN, USA.
60. D. Shepelyansky, 22 - 27 aout 2002, conférence internationale « Feynman Festival », Univ. of Maryland, College Park, MD, USA.
61. 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.
62. B. Georgeot, 28-29 janvier 2003: conférence internationale « Inhomogeneous random systems », Université de Cergy Pontoise, France.
63. D. Shepelyansky, 10 - 21 février 2003, International Euroworkshop « Quantum computers: nanoscopic implementation », ISI, Villa Gualino, Torino, Italy
64. D. Shepelyansky, 25 Avril 2003, exposé invité à la Journée de Physique pour l'Institut de Mathématiques, Calcul et contrôle quantiques, Paris.
65. D. Shepelyansky, 24 - 25 Mai 2003, International Workshop on Quantum Chaos and Localisation, Warsaw, Poland.
66. D. Shepelyansky, 9 - 10 Juin 2003. ARO/NSA/ARDA meeting « Theory in Quantum Computing », Harper's Ferry, West Virginia, USA.
67. D. Shepelyansky, 17 - 21 Juin 2003, NATO Advanced Research Workshop « Quantum chaos: theory and applications », Como, Italy.
68. D. Shepelyansky, 18 - 23 Aout 2003, Quantum computing program review organized by ARO/NSA/ARDA, Nashville, TN, USA.
69. D. Shepelyansky, 15 - 17 Septembre 2003, International Conference « Kolmogorov's legacy in physics: one century of chaos, turbulence and complexity », ICTP, Trieste, Italy.
70. D. Shepelyansky, 8 - 12 December 2003, international workshop « Fundamentals of solid state quantum information processing », Lorentz Center, Leiden, Netherlands.
71. Klaus Frahm, janvier 2004 conférence internationale: XXXIXth Rencontres de Moriond: « Quantum Information and Decoherence in Nanosystems » La Thuile.
72. D. Shepelyansky, 16 - 18 February 2004, EU IST-FET QIPC Program Review, Bratislava, SK.
73. D. Shepelyansky, 30 March - 2 April 2004, International workshop « Quantum entanglement - from error correction to secure key distribution », Waldemar-Peterson Haus, Hirschegg, Austria.

74. B. Georgeot, 14 - 21 juin 2004: workshop international « Quantum Chaos and Its Application to Mesoscopic Physics », Asia Pacific Center for Theoretical Physics, Pohang, Corée du Sud.
75. Klaus Frahm, décembre 2004: conférence nationale, rencontre du GDR 2426 « Physique Quantique Mésoscopique », Aussois, France.
76. D. Shepelyansky, avril 2005, NATO Advanced Research Workshop « Decoherence, entanglement and information protection in complex quantum systems », Ecole de Physique Les Houches, France.
77. D. Shepelyansky, 25 - 28 May 2004, SPIE Conference 5472 « Noise and information in nanoelectronics », Maspalamos, Gran Canaria, Spain.
78. D. Shepelyansky, 14-16 February, 2005, IST-FET QIPC Review, Innsbruck, Austria.
79. B. Georgeot, 3-7 mai 2005, conférence internationale « ICSSUR' 2005 » (9th International Conference on Squeezed States and Uncertainty Relations), Besançon, France.
80. D. Shepelyansky, May 19 - 22, 2005, 2nd Workshop « Quantum chaos and localisation phenomena », Inst. of Physics, Polish Academy of Sciences, Warsaw, Poland.
81. B. Georgeot, 22-27 mai 2005, conférence internationale « ACAT 2005 » (X International Workshop on Advanced Computing and Analysis Techniques in Physics Research), Zeuthen, Allemagne.
82. B. Georgeot, 5-15 juillet 2005, 3 cours invités à l'école d'été « Quantum Computers, Algorithms and Chaos », International School of Physics « Enrico Fermi », Varenna, Italie.
83. D. Shepelyansky, August 22 - 24, 2005, KIAS-KAIST 2005 Workshop on « Quantum information science », Seoul, South Korea.
84. D. Braun, August 22 - 24, 2005, KIAS-KAIST 2005 Workshop on « Quantum information science », Seoul, South Korea.

Agrégats

85. E. Suraud, Rencontres des Physiciens Nucléaires Théoriciens, Orsay, mars 2002.
86. E. Suraud, International workshop on Similarity in Diversity (SID 8), Univ. at Buffalo, Buffalo, NY, USA, mai 2002.
87. E. Suraud, International workshop on Swift Heavy Ions in Matter (SHIM02), Taormina, Sicile, mai 2002.
88. M. Belkacem, International workshop on Formation of Correlations, Bad Honnef, Allemagne, juin 2002.
89. E. Suraud, XXVI Intern. Workshop on Condens. Matter Theories, Luso, Portugal, septembre 2002.
90. P. M. Dinh, Rencontres des Physiciens Nucléaires Théoriciens, Lyon, avril 2003.
91. E. Suraud, VIII Intern. Workshop on Nonequilibrium Physics at Short Time Scales, Max-Planck Institut für Physik Komplexer Systeme, Dresden, mai 2003.
92. P. M. Dinh, VIII Intern. Workshop on Nonequilibrium Physics at Short Time Scales, Max-Planck Institut für Physik Komplexer Systeme, Dresden, mai 2003.
93. E. Suraud, International workshop on materials, Saclay, France, juin 2003.
94. E. Suraud, International workshop on Density Functional Theory, ECT*, Trento, Italie, juillet 2003.
95. E. Suraud, Intern. conference NANOMAT 2003, Bruxelles, Belgique, Octobre 2003.
96. E. Suraud, International workshop VLASOVIA, Nancy, France, Novembre 2003.
97. E. Suraud, International workshop WCI 2, Catania, Italie, janvier 2004.
98. E. Suraud, International workshop TAMC4, Toulouse, France, avril 2004
99. E. Suraud, International school Ettore Majorana, Erice, Italie, avril 2004.
100. E. Suraud, International conference ISSPIC12, Nanjing, Chine, septembre 2004.
101. E. Suraud, International workshop on clusters, Lanzhou, Chine, septembre 2004.
102. E. Suraud, International workshop WCI 3, Texas A&M, USA, février 2005.
103. E. Suraud, Ecole DFT, Caen, Juin 2005
104. E. Suraud, International workshop CMT 29, Nara, Japon, septembre 2005
105. E. Suraud, Symposium PG Reinhard, Erlangen, Allemagne, octobre 2005

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 noeuds 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 noeuds 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.
 - Durée: 2 ans à partir du 1er janvier 2002, en continuation du PROCOPE 1999-2001 (collaboration Erlangen - Toulouse) de E. Suraud.
 - Équipe impliquée: Agrégats
 - Coordinateurs: E. Suraud (Toulouse), P.-G. Reinhard (Erlangen), B. Gervais (Caen)
7. PROCOPE Collaboration Erlangen (Allemagne) - Toulouse.
 - Durée: 2 ans à partir du 1er janvier 2004.
 - Équipe impliquée: Agrégats
 - Coordinateurs: M. Belkacem (Toulouse) & G. Zwicknagel (Erlangen)
8. Séjour Scientifique de Haut Niveau de P. G. Reinhard (Univ. Erlangen, Allemagne)
 - Durée: 4 mois à partir de septembre 2005.
 - Équipe impliquée: Agrégats
 - Coordinateur: E. Suraud
9. Programme de collaboration du Centre de Coopération Universitaire Franco-Bavarois
 - Durée: un an à partir de juin 2005.
 - Coordinateurs: S. Capponi (Toulouse) et F. Assaad (Würzburg, Allemagne).

3.4.2 Organisations de conférences, workshops et rencontres

1. Organisation par D. Shepelyansky et R. Fleckinger du workshop international « Quantware », Toulouse 1-14 Juillet 2002
2. Organisation par D. Shepelyansky (avec G. Casati et P. Zoller) de l'école d'été International School of Physics « Enrico Fermi » « Quantum Computers, Algorithms and Chaos » (Varenna, Italie, 5-15 juillet 2005).
3. Organisation par M. Belkacem, P. M. Dinh, M. Mambrini 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.
4. Organisation par D. Poilblanc et M. Mambrini du colloque « Strongly correlated fermion systems », JMC9 de la SFP (Nancy, août 2004), (Organisateurs JMC9: D. Malterre & A. Schuhl)
5. Organisation par F. Alet, F. Calvo, S. Capponi et A. Finel du colloque « Méthode Monte-Carlo en matière condensée », JMC9 de la SFP (Nancy, août 2004), (Organisateurs JMC9: D. Malterre & A. Schuhl)
6. 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].
7. Minicolloque organisé par D. Dean: « Statistical Physics of Complex Systems » (Toulouse, 4 juillet 2003).
8. Réunion du GDR NEEM, 22-25 juin 2004 (Aspet) organisé par D. Poilblanc.
9. « Exploratory Workshop » (international) de la European Science Foundation (ESF), « Numerical simulations for correlated systems », organisé par D. Poilblanc (Peyresq, 12-18 sept. 2005).
10. Ecoles d'été E2PHY (participation au comité national d'organisation, E. Suraud), 2002 à 2005 (<http://e2phy.in2p3.fr/>)

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 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, G. Pastor et N. Suaud (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 (et F. Alet, à partir du 1er oct. 2005). 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 au Laboratoire de Physique de la Matière Condensée de Toulouse (étude de boîtes quantiques semi-conductrices); l'équipe « Cohérence quantique & information quantique » 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) qui couvre à la fois les thématiques du GDR 2069 et celles des matériaux moléculaires (D. Poilblanc est membre du bureau),

pour la composante FFC,

- GDR « Physique quantique mésoscopique » (G. Montambaux)
- GDR 2285 « Information & communication quantique » (J.-P. Poizat) (B. Georgeot est membre du bureau)

pour la composante CQIQ,

- 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.
- 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. De plus il est membre élu titulaire de la CS30 de l'UPS.
- P. M. Dinh est membre élu du Conseil du Département de Physique depuis novembre 2004.
- 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, membre élu du CS de l'UPS 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 DSPT2 de la MSTP du MENRT,
 - directeur adjoint scientifique de l'IN2P3 en charge de l'interdisciplinaire et des relations avec les universités et avec les régions.

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, <http://www.avh.de/>) en 2002 et a été élu à l'Académie Européenne des Sciences en 2003 (<http://www.eurasc.org/>).