

PROJET PHYNUM

Rappel de la problématique et des objectifs scientifiques

Objectifs :

- **calculs**
- **ouverture vers les grands centres de calcul**
- **partage d'expertise technique**
- **fédération des communautés autour de thèmes scientifiques et partage d'expertise scientifique**
- **essor de la modélisation en physique (couplage aux projets d'enseignement numérique)**

L'année 2002 a vu la mise en place du pôle modélisation en physique. Ce pôle a pour but de faciliter le partage d'expérience à la fois sur le plan scientifique et sur un plan technique sur les grands thèmes de la physique numérique (Monte Carlo, Dynamique Moléculaire, Calculs ab initio,). Soulignons à ce titre que les départements Chimie et Physique du CNRS sont très favorables au développement à Grenoble des approches numériques en sciences des matériaux. Dans ce cadre, ce pôle va participer à l'émergence de nouveaux projets au sein de notre communauté comme par exemple le thème « nanophysique ». Cette infrastructure pourra aussi donner lieu à des collaborations transdisciplinaires plus fortes notamment avec l'astrophysique et les mathématiques appliquées. Des liens étroits sont déjà établis entre le LPMMC et le LGIT et un rapprochement thématique fort autour de la modélisation moléculaire ab initio est amorcé avec les astrophysiciens et les chimistes quanticiens.

Ce pôle sera utilisé par tous les chercheurs et les thésards ou post-doctorants impliqués dans les thèmes de recherche proposés. Il sera aussi accessible aux étudiants des écoles doctorales de l'UJF. Une série de cours traitant des principales méthodes en physique numérique a été mise en place, en particulier dans la formation « Modélisation et Simulation Numérique » organisée par Stéphane ROCH et Philippe PEYLA, formation qui a débuté en Février 2002. Des invités de renom seront aussi associés à ce développement du numérique à Grenoble grâce au soutien de l'IPMC et du CECAM-Lyon. Ainsi avons-nous accueilli depuis Janvier 2002, D. Ceperley et N. Ashcroft.

Point technique début Juillet 2003

- **Sur l'implantation de la machine**

Contrairement à ce qu'on pensait l'année dernière, nous n'avons pas pu profiter de la salle de calcul existante de l'observatoire pour l'installation de notre cluster, ceci à cause de la puissance électrique et de la puissance de refroidissement nécessaires à ce type de « machine ».

Nous avons exploré les différentes possibilités d'hébergement de notre cluster sur le campus et avons finalement décidé de coupler notre projet avec le futur projet de l'observatoire. Nous avons donc participé à l'aménagement d'une nouvelle salle informatique dans les locaux de l'observatoire (en cours).

Concernant le réseau, l'observatoire dispose d'un accès Gigabit, le CNRS a fait l'objet en 2002 d'une totale remise à niveau de son réseau (grâce à une subvention du CNRS), en particulier l'ensemble des laboratoires sont connectés au Gb à metronet.

- **Sur les choix techniques**

La majorité des codes concernés actuellement par le projet est soit déjà parallélisée (MPI), soit parallélisable. Nous nous sommes donc naturellement orientés vers un « cluster » de processeurs. Compte tenu de la nature même de nos codes, de l'évolution actuelle des technologies et des marchés, nous avons retenu un cluster de PCs à base de AMD athlon.

Nous avons effectué au début de l'année 2002 une série de tests sur des PCs bi-processeurs à base de processeurs athlon 1800+.

Ces tests nous ont permis d'affiner nos besoins et de cerner les points de difficultés sur ce type de matériel. En particulier :

- il était important d'observer le comportement des processeurs en charge pendant une longue durée (au moins 24h), à cause d'une tendance à la surchauffe de ce type de processeurs lorsqu'ils ne sont pas suffisamment ventilés.
- Il était important d'observer la stabilité de ces PCs parce que le changement d'un seul composant peut sembler-t-il profondément affecter le bon fonctionnement du PC.

Nous avons également effectué des tests sur les commutateurs giga (à partir de prêts d'un fournisseur).. Nous avons sélectionné en fonction de son prix par prise et de ses performances un commutateur HP procure giga 48 ports.

Nous avons fait le choix d'acquérir les différents éléments du cluster séparément les uns des autres parce que le choix du commutateur et des autres périphériques n'avait que très peu d'incidence sur le choix des nœuds de calcul. Cette approche permettait aussi de choisir une procédure de mise en concurrence simplifiée (plafond 130 Keuros) pour les nœuds de calcul et des procédures plus légères pour le reste du matériel.

Nous avons choisi les nœuds de calcul entre plusieurs propositions dont les caractéristiques techniques étaient très proches des spécifications techniques que nous avons prédéfinies. Le critère de choix déterminant a été la performance des nœuds (indépendamment du réseau).

En conclusion notre cluster sera donc (livraison attendue début septembre) constitué :

- de 40 nœuds qui sont des PCs bi processeurs à base de Athlon 2000+, dotés de 2Go de mémoire vive et de disques durs de 120 Go.
- Les communications entre les nœuds sont assurées par un commutateur giga HP.
- Les données seront stockées sur une baie raid de plus de 1 téra de capacité.

Aspects financiers :

Recettes :

Le CNRS, par l'intermédiaire du COMI et du département SPM, a récemment accordé une subvention de 228 Keuros pour la rénovation du réseau du polygone du CNRS (ce réseau assure un débit de 1GB du coeur des laboratoires à Métronet)

Enfin, nous avons obtenu en 2002 une enveloppe approximative de 190 Keuros sur les 228 Keuros prévus initialement dans le cadre du CPER , le solde sera disponible en fin d'année ou en 2003.

Dépenses :

Voici l'état actuel de nos dépenses :

- 40 nœuds bi pro : 130 Keuros
- commutateur : environ 20 Keuros
- baie raid : environ 5 Keuros
- travaux salle de l'observatoire : 10 Keuros
- onduleur : environ 6 Keuros

Problématique, liste des thèmes abordés

Grenoble a été en France un des premiers centres de Physique à s'engager dans la voie des calculs ab initio dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité et possède maintenant une grande expertise dans ce domaine. Les problèmes posés par les physiciens ou les chimistes amènent souvent à considérer des objets de grande taille: nanotubes, agrégats, oxydes supraconducteurs, intermétalliques, etc Une modélisation quantique réaliste de ces problèmes demande à considérer des systèmes moléculaires ou solides à grand nombre d'atomes et donc aussi d'électrons.

Les calculs de structure électronique de ces systèmes à grande taille pose de sérieux problèmes de ressources informatiques au niveau du temps CPU et de la taille mémoire. La difficulté principale vient du fait que la complexité du calcul varie généralement beaucoup plus vite que le nombre d'électrons N dans le système. Ce comportement est N^3 pour les méthodes de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) voire un exposant plus élevé pour les méthodes de type Hartree-Fock avec interaction de configurations. Depuis quelques années, une nouvelle classe de méthodes est en développement. Ces approches visent à obtenir une évolution linéaire du temps de calcul avec le nombre d'électrons. Cette nouvelle classe de méthodes "d'ordre N " devrait permettre d'aborder efficacement la structure électronique des systèmes de grande taille.

Un des buts de ce projet est donc de mener des calculs de structure électronique et de dynamique moléculaire sur des systèmes complexes. L'approche méthodologique se situe à trois niveaux.

- Des programmes "standard" académiques mais performants de type pseudopotentiels ou muffin tin seront utilisés et optimisés sur machine vectorielles et parallèles. Cette approche pragmatique permet à la fois de démarrer des applications dès le début du projet et d'avoir un outil de comparaison pour la précision des résultats et les performances CPU des codes d'ordre N .

- Des programmes d'ordre N seront mis en œuvre en collaboration avec le CEA de Grenoble (Goedecker et Deutsch du DRFMC) et l'ENS de Lyon (P. Sautet et E. Artacho). Un travail méthodologique sera effectué pour adapter ce type de programme aux besoins des applications. Un effort particulier sera porté sur la dynamique moléculaire. Ces algorithmes d'ordre N représentent une percée et devraient permettre d'aborder les calculs sur des systèmes de taille nettement plus grande qu'un programme classique. La collaboration avec d'autres équipes devrait permettre d'avoir un point de départ de qualité sur lequel des développements ultérieurs seront menés. Notamment les calculs de fonctions de réponse électronique seront implémentés dans ces codes d'ordre N ouvrant de nombreuses applications: calculs des excitations électroniques par une approche de quasiparticules, spectroscopies électroniques et vibrationnelles.
- Le traitement théorique des effets de corrélation par des approches de type modèle de Hubbard, méthode de Gutzwiller et champ moyen dynamique et la mise en œuvre de ces méthodes dans les calculs ab initio.

Un autre but de ce pôle de modélisation est de favoriser les échanges autour des simulations classiques de type Monte Carlo ou dynamique moléculaire. Ces méthodes permettent entre autres d'étudier l'évolution d'un système dans le temps et notamment d'aborder la dynamique réactionnelle, l'auto-organisation de nanostructures et les phénomènes de croissance. A titre d'exemple, des interactions élastiques à longue portée peuvent être introduites dans une approche de type Monte Carlo afin d'étudier l'effet des contraintes sur les lois d'échelle de la nucléation. A terme l'ambition est de prédire la façon dont s'organisent les atomes et d'optimiser la croissance de fils ou boîtes quantiques. Les transitions de phases sont aussi traitées par ces approches: cela concerne à la fois l'étude de mises en ordre d'espèces chimiques sur réseau prédéfini comme l'étude des transitions sous haute pression. On va aussi retrouver une approche de type Monte Carlo dans la résolution de la propagation des ondes sismiques, cette approche fournissant une solution exacte de l'équation du transfert radiatif dynamique qui tient compte de la géométrie de la croûte, la taille des inhomogénéités et la polarisation des ondes élastiques.

A côté de ces approches déjà bien en place, d'autres thèmes théoriques sont en pleine émergence. Nous avons décidé de les présenter plus en détails ci-dessous avec aussi quelques exemples parmi les projets en cours d'exécution.

APPLICATIONS:

1. Modélisation de la croissance CVD . L. Magaud (LEPES), A. Pasturel (LPMMC), M. Pons (LTPCM-INPG) et R. Madar (LMGP-INPG).

Si l'utilisation des méthodes ab initio pour traiter les surfaces devient "relativement" courante, il n'en est pas de même pour tout ce qui concerne les problèmes associés à la croissance car il s'agit de phénomènes complexes et de grande taille. Dans le cadre de la modélisation de la croissance de SiC (polytype 4H) l'approche ab initio est utilisée pour décrire l'arrivée des molécules gazeuses sur une surface puis pour déterminer les chemins d'activation qui permettent aux espèces absorbées de diffuser en surface. Une des particularités de SiC est d'exister sous forme de nombreux polytypes. La nature du polytype, définie par la séquence d'empilement des plans (cubique ou hexagonale) dépend fortement des conditions de croissance. Ce matériau est complémentaire du silicium pour l'industrie de la microélectronique puisqu'il peut être utilisé à haute fréquence et haute température ... Le polytype 4H a été choisi car il a les propriétés électroniques les plus intéressantes. Après avoir calculé les énergies

de surface en fonction de la polarité (terminaison Si ou C) et de la distance surface-faute d'empilement, nous nous intéressons à la morphologie des marches, à l'énergie que coûte le dépôt d'un biplan en fonction de la nature de la surface afin de mieux comprendre les différents modes de croissance observés expérimentalement: croissance par avancée de marche, regroupement de marche, conservation ou non du polytype. Cette approche qui est en cours constitue la première partie du traitement de la croissance de SiC. Pour la suite, il s'agit de modéliser des défauts isolés ou des distributions de marches. Il est alors indispensable d'avoir un programme de calcul d'ordre N pour mener à bien de tels calculs et pour traiter l'interaction entre ces substrats et des molécules gazeuses. Ces résultats ab initio seront alors couplés à des simulations de type Monte Carlo cinétique pour étudier la croissance.

2. Elasticité de la croissance cristalline et auto-organisation de nanostructures. P. Peyla et A. Pasturel (LPMMC), P. Quemerais et D. Mayou (LEPES), C. Misbah (Spectro).

La croissance par hétéroépitaxie permet le dépôt cohérent (sans dislocation) d'un matériau A sur un matériau B qui n'ont pas le même paramètre de maille. Cette différence structurale entre les matériaux utilisés (semiconducteurs, métaux) conduit à des interactions élastiques à longue portée entre atomes déposés pendant la croissance. Les interactions élastiques sont à l'origine de cette auto-organisation d'îlots nanométriques. De telles organisations ont été observées soit dans une croissance de type Stranski-Krastanov où il y a formation d'îlots tridimensionnels après quelques couches d'adsorbat déposées, soit dans une croissance de type Volmer-Weber pendant laquelle dès le début du dépôt il y a apparition d'îlots tridimensionnels. Ces structures organisées sont de bonnes candidates pour l'élaboration de boîtes quantiques.

L'objectif est d'intégrer ces interactions élastiques à des simulations numériques (de type Monte Carlo ou dynamique moléculaire) afin de mieux maîtriser les effets de la contrainte sur les tailles d'îlots et étudier l'effet des contraintes sur les lois d'échelle de la nucléation. Un code Monte Carlo intégrant ces interactions à longue portée existe depuis peu. Ce code permet de plus de simuler la croissance par épitaxie par jet moléculaire (EJM) d'une couche constituée de deux composés chimiquement différents. Ainsi nous espérons obtenir des résultats sur la démixtion en présence d'interactions élastiques.

Nous avons vu que le dépôt d'atomes sur une surface la déforme et crée une distribution de forces autour des adsorbats que l'on considère comme défauts. La théorie continue de l'élasticité comme appliquée ci-dessus prédit que cette déformation introduit une interaction entre défauts. L'accès aux forces étant possible par calcul ab initio, il nous est apparu important de tester cette théorie. Nous comptons étudier dans un premier temps un système relativement simple constitué d'atomes d'oxygène sur une surface de graphite afin de tester nos résultats obtenus dans le cadre de la théorie des milieux continus.

3. Propriétés de transport aux interfaces métal-isolant. O. Lebacqz, A. Pasturel (LPMMC), D. Mayou et L. Magaud (LEPES), S. Roche (CEA)

Le transport d'électrons dépendant du spin dans les hétérostructures combinant des matériaux ferromagnétiques et des oxydes ou des matériaux semi-conducteurs constitue actuellement un sujet d'un intérêt majeur (réalisation de valves de spin et de mémoire non-volatile pour ordinateurs). Une compréhension exacte des phénomènes de transport mis en jeu dans ces matériaux nécessite la connaissance réaliste de la structure électronique des matériaux ferromagnétiques, des semi-conducteurs et des oxydes, et plus spécialement des interfaces qui les séparent. Notre projet concernant ces matériaux tient dans l'étude théorique de ces phénomènes de transport par les méthodes de calcul de structure électronique ab initio. Elle visera à caractériser les propriétés de l'état fondamental de ces interfaces mais aussi à effectuer un travail de développement numérique visant à décrire la dynamique de spin des hétérostructures via le formalisme de Kubo-Greenwood et les techniques de fonction de Green.

4. Supraconductivité dans des systèmes de dimension réduite. F. Hekking, A. Pasturel (LPMMC) et P. Schuck (ISN).

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

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

Remarquablement, une étude systématique des effets de taille finie sur la force même d'appariement n'existe pas. Jusqu'ici, on a supposé que le mécanisme microscopique de la supraconductivité décrit ci-dessus s'applique également dans le cas d'un nanograin supraconducteur. Pourtant, il n'est pas évident que cette supposition soit correcte. Par exemple, l'effet de la quantification du spectre des phonons ainsi que l'effet des phonons de surface sur l'écrantage des interactions Coulombiennes dans un nanograin n'est pas connu. Dans ce projet nous nous proposons d'étudier l'origine de la force d'appariement dans un supraconducteur mésoscopique avec plus de détail. Dans un premier temps on étudiera l'influence des effets quantiques dus à la taille finie du système sur le comportement des phonons. Ensuite, une description réaliste sera développée afin de décrire l'écrantage des interactions Coulombiennes dans un grain de dimension réduite, tout en tenant compte du confinement des phonons.

5. Dynamique des vésicules en écoulement (Thierry Bideau (SPECTRO), C. Misbah (SPECTRO))

le projet scientifique s'inscrit dans la thématique de la matière molle, de la dynamique et des transitions de phases sous écoulement. Nous nous intéressons de manière générale à la dynamique des systèmes constitués de plusieurs phases, comme les émulsions, les microémulsions, ou bien des interfaces entre fluides simples et/ou complexes.

Le problème qui nous occupe actuellement, et sur lequel nous aurions besoin des moyens de calcul de PHYNUM, porte sur la dynamique des vésicules en écoulement.

Les vésicules sont constituées par des membranes de phospholipides qui sont refermées sur elles mêmes pour former un sac d'une centaine de microns renfermant essentiellement de l'eau. Ces vésicules sont des systèmes modèles pour un grand nombre de problèmes. Tout d'abord ce sont des systèmes déformables qui ont une grande parenté avec les gouttelettes que l'on trouve dans les émulsions. Ce sont également pour les physiciens un modèle d'ordre zéro pour les cellules biologiques comme les globules rouges. Enfin, les propriétés hydrodynamiques de ces vésicules sont très sensibles à la nature amphiphile de leur membranes, ce qui les place au carrefour entre différents domaines de la physique des liquides: la physique des systèmes amphiphiles, la physique des fluides complexes, la rhéologie, et la biophysique.

A la base, le problème que nous souhaitons résoudre est un problème 3D sur réseau. C'est un problème essentiellement local, bien que l'on utilise aussi des transformées de Fourier. Ces modèles sont donc facilement parallélisables, et nous sommes donc essentiellement intéressés par une machine parallèle.

6. Transport thermique dans un conducteur mésoscopique. F. Hekking (LPMMC), Ph. Ghandit et J. Chaussy (CRTBT).

Dans la théorie du liquide de Fermi, la charge ainsi que l'énergie sont portées par des quasiparticules fermioniques. Cela donne lieu à une relation universelle entre la conductivité électrique et la conductivité thermique : la loi de Wiedemann-Franz (WF). Des effets quantiques dans des conducteurs mésoscopiques peuvent modifier la loi de WF. Ceux-ci sont dus à la nature ondulatoire des électrons qui mène aux interférences quantiques et qui modifient fortement le transport thermoélectrique. En présence d'interactions Coulombiennes entre électrons, on s'attend à des corrections dues à un comportement de type non liquide de Fermi. Pour identifier et calculer les coefficients de transport thermoélectrique d'un conducteur mésoscopique, on a tout d'abord besoin d'une théorie de réponse linéaire aux perturbations thermoélectriques. Luttinger a développé une telle théorie et a calculé des fonctions de réponse locales à fréquence nulle. Cependant, cette théorie ne s'applique pas dans le cas d'un conducteur mésoscopique : pour tenir compte du caractère ondulatoire du transport, il nous faut une théorie non-locale à fréquence finie.

Ensuite les conductivités électrique et thermique seront calculées numériquement (en résolvant les équations de mouvement pour les fonctions de Green retardés qui décrivent la propagation des ondes électroniques dans le système) pour des géométries réalistes, comme par exemple pour un fil quantique ou une couche mince. On s'attend à ce que les résultats montrent une forte dépendance à la façon dont le système est connecté aux fils de mesure : ce couplage peut induire une diffusion additionnelle qui change inévitablement les propriétés de transport thermoélectrique.

7. Propriétés thermodynamiques et de transport d'une jonction métal normal-supraconducteur mésoscopique. F. Hekking (LPMMC), H. Courtois (CRTBT) et M. Sanquer (CEA) et F. Pistolesi (LPMMC).

Le transport électrique à basse énergie à travers une jonction mésoscopique entre un métal normal (N) et un supraconducteur (S) est dû à un passage de deux électrons (réflexion d'Andreev). Si le métal est désordonné, la conductance dans la bande interdite est fortement augmentée par l'effet des interférences mésoscopiques. En effet, la réflexion d'Andreev est liée à la diffusion cohérente de type particule-particule au voisinage de la jonction. Les jonctions NS fournissent donc un outil intéressant pour l'étude de la propagation cohérente des électrons dans une structure hybride NS. Une expérience récente au CEA, par exemple, a démontré que le bruit de grenaille dans une jonction NS est déterminée par la diffusion cohérente des paires de Cooper induites dans le métal normal par l'effet de proximité. D'autres expériences au CEA ainsi qu'au CRTBT étudient, à l'aide d'un microscope à effet tunnel (STM), la densité d'états dans les systèmes hybrides NS. Bien que le comportement général trouvé lors de ces expériences soit compris au moins qualitativement, une interprétation qualitative et plus détaillée manque encore.

La modélisation de ces systèmes se fait dans le cadre des fonctions de Green matricielles de Keldysh. Dans le formalisme quasiclassique, ces fonctions obéissent à l'équation d'Usadel, équation matricielle de type diffusion. La solution de cette équation ne se calcule analytiquement que dans des cas simples et peu réalistes. Afin de décrire les géométries pertinentes pour les expériences une intégration numérique est prévue.

8. Manipulation des états quantiques dans de nanocircuits supraconducteurs. F. Hekking (LPMMC), O. Buisson (CRTBT), Ph. Lafarge (LCMI).

Le calcul quantique est une thématique naissante qui se situe à la frontière entre la théorie de l'information classique, les sciences de l'informatique et la mécanique quantique. Le concept de base pour cette informatique quantique est le "bit" quantique qui correspond à une superposition de l'état 0 et 1. Sa manipulation permet d'effectuer les opérations. Cependant sa réalisation expérimentale constitue un défi pour les sciences fondamentales car aucun système physique ne remplit, aujourd'hui, toutes les conditions requises (long temps de décohérence, intégrabilité, reproductibilité des circuits).

Parmi les systèmes expérimentaux envisagés, les circuits quantiques à base de nano-jonctions Josephson supraconductrices sont prédits comme des candidats potentiels. De premières expériences ont démontré que ce type de circuit se comporte comme un système quantique à deux niveaux avec des états propres qui évoluent de façon cohérente dans le temps.

Pendant ce projet on se propose d'étudier théoriquement la dynamique de deux circuits quantiques supraconducteurs particuliers, en vue des expériences mises au point actuellement au CRTBT (O. Buisson) et au LCMI (Ph. Lafarge).

Le premier circuit comporte un bit quantique Josephson couplé à un résonateur supraconducteur. Nous souhaitons comprendre l'évolution quantique dans le temps des états propres du système à deux niveaux en présence du résonateur. Nous voulons notamment mettre en évidence les états enchevêtrés qui résultent du couplage entre le bit quantique et le résonateur. Le deuxième système est essentiellement une triple jonction Josephson (c.a.d. trois barrières tunnel de faible capacité qui séparent quatre électrodes supraconductrices). Afin de mieux comprendre les propriétés quantiques de ce système, des expériences de transport sont mises au point à présent au LCMI.

La modélisation des circuits quantiques supraconducteurs se fait à l'aide de la description habituelle (théorie « orthodoxe ») des jonctions Josephson de faible capacité. Elle est perturbative pour ce qui est le passage des quasiparticules ou des paires de Cooper à travers la barrière tunnel (Hamiltonien tunnel), par contre elle prend en compte de façon non-perturbative les interactions Coulombiennes (énergie de charge). Finalement, on peut introduire la décohérence dans le cadre du modèle de Caldeira-Leggett (couplage à un bain d'oscillateurs harmoniques). Si l'on s'intéresse au transport on peut, à partir de la description présentée ci-dessus, utiliser une approche numérique du type équation pilote afin de trouver la probabilité quantique de trouver le système dans un certain état propre. Ensuite un calcul à l'aide de la règle d'or permettra de trouver les caractéristiques courant-tension. Pour ce qui est des propriétés dynamiques, la diagonalisation de la matrice hamiltonienne permettra de trouver directement l'évolution dans le temps des états propres.

9. Simulations de la propagation des ondes sismiques dans la croûte terrestre. B van Tiggelen, N. Tregoures (LPMMC), M. Campillo, G. Lacombe et R. Heninno (LGIT).

La diffusion multiple des ondes sismiques est reconnue depuis quelques années. Sur Grenoble une collaboration interdisciplinaire a été établie entre le LPMMC et le LGIT. Deux approches différentes ont été mises en œuvre pour décrire la propagation et la diffusion des ondes élastiques. Les deux approches devraient nous fournir une compréhension complète de la physique derrière le coda sismique, i.e., les enregistrements sismiques de longue portée observés après un tremblement de terre. Tout d'abord une simulation numérique de type Monte Carlo fournirait en principe une solution exacte du transfert radiatif dynamique qui tient compte de la géométrie de la croûte, de la taille des inhomogénéités et de la polarisation des ondes élastiques. Un premier travail a été effectué en 1998 mais sans prendre en compte la polarisation. La continuité de ce travail est prévue dans le cadre d'une thèse pour les deux prochaines années. Avant tout il s'agit de calculs qui nécessitent beaucoup de mémoire et de temps CPU sur une machine multiprocesseur.

Une deuxième approche concerne le développement d'une théorie analytique qui décrit le couplage entre les différents modes de propagation de sondes dans la croûte. Cette théorie doit permettre d'étudier précisément comment l'énergie élastique sera distribuée - en fonction du temps - parmi les modes propres. Le calcul symbolique nécessaire à cette approche est très consommateur de temps CPU.

10. Etude de la diffusion multiple de la lumière en milieu complexe. B. van Tiggelen et S. Skipetrov (LPMMC).

La diffusion multiple de la lumière dans les "milieux complexes" est un des thèmes majeurs du LPMMC. Ces "milieux complexes" sont des milieux fortement hétérogènes contenant des symétries brisées, comme les cristaux liquides nématiques (brisure de symétrie de rotation), et des terres rares sous champ magnétique (brisure de symétrie par renversement temporel) ou des milieux chiraux (brisure de symétrie miroir, par exemple le sang ou les cristaux liquides cholestériques). La brisure est

toujours accompagnée de nouveaux phénomènes, comme la diffusion anisotrope ou l'effet Hall Photonique. Une collaboration étroite se fait avec l'équipe 'magnéto-optique' du LCMI qui a observé pour la première fois le dichroïsme magnéto-chiral, un effet magnéto-optique présent dans un milieu chiral sous champ magnétique. En 1999, une approche numérique développée par David Lacoste permet de calculer la diffusion simple et multiple de la lumière sous champ magnétique. Depuis 1996, une autre approche permet de calculer la diffusion multiple de la lumière dans des cristaux liquides en phase nématique. Dans les deux cas, la haute précision souhaitée rend ces programmes très consommateurs de temps CPU. En outre on travaille sur des extensions afin de pouvoir décrire les cholestériques ou un mélange de diffuseurs chiraux et de diffuseurs magnéto-actifs.