

Mécanique quantique Avancée

1. **Propriétés d'opérateurs**
 - exponentiel
 - translation
 - rotation
 - propagateurs
 - Tensorielles

2. **Problèmes à N corps**
 - symétrisation
 - permutations
 - espace de Fock, seconde quantification
 - opérateurs de création/annihilation pour bosons et fermions
 - opérateurs à 1 et à 2 corps
 - transformations unitaires et opérateurs de champ
 - Hartree-Fock, champ moyen et méthode variationnelle
 - introduction à la théorie BCS
 - applications en optique quantique: Jaynes-Cummings, Wigner-Weisskopf

3. **Mécanique classique vs MQ**
 - approximation semi-classique: WKB
 - phases géométriques
 - effet Aharonov-Bohm

4. **MQ à la Feynmann - intégrales de chemin**
 - du propagateur infinitésimal au propagateur fini
 - introduction aux intégrales de chemin
 - connexion avec la MQ habituelle
 - particules libres
 - oscillateur harmonique

5. **MQ relativiste**
 - équation de Dirac
 - spin
 - facteur g de l'électron

Physique Statistique Avancée

1) Approximation champ moyen :

Méthode variationnelle, méthode du colle pour système sur hypergraphes pour modèle de Potts, classification des transitions de phases, approximation de Bethe.

2) Développement du viriel:

Développement diagrammatique, théorème de Meyer, exemple pour sphères dures.

3) Modèles unidimensionnels:

Matrices de transfert, longueur de corrélation.

4) Théorie de Landau:

Intégrales fonctionnelles, critère de Ginzburg et dimensions critiques, modèle gaussien.

5) Groupe de renormalisation:

Invariance d'échelle et classe d'universalité, relations d'échelle entre exposants critiques, grandeurs pertinentes, non pertinentes, et marginales, justification du caractère universel des transitions du second ordre, renormalisation dans espace réel (Migdal-Kadanoff), exemple pour modèle d'Ising à deux dimensions sur réseau triangulaire.

Physique du Solide Avancée

A. Propriétés électroniques des solides

A.I. Les différents modes de description des états électroniques dans les solides :

Bases d'états délocalisés/localisés

I.1. Etats électroniques délocalisés

- a) Rappel théorème de Bloch, Théories $\mathbf{k.p}$ multibandes,
- b) exemples de structures de bandes, comparaison avec l'approche type liaisons fortes
- c) couplage spin-orbite dans matériaux avec ou sans centre d'inversion et introduction à la physique du spin dans les matériaux massifs

I.2. Théorie de la fonction enveloppe

- a) Etats et équation de Wannier
- b) applications : description des états localisés dans les semiconducteurs, états excitoniques.

A. II. Transport électronique Quantique :

II.1. Etats électroniques en champ magnétique

- a) Densité d'états en présence d'un champ magnétique
- b) Magnetorésistance dans le domaine quantique : oscillations de Shubnikov de Haas
- c) Effet Hall Quantique, électrons a deux dimensions.

II.2. Localisation faible

- a) Etats localisés
- b) Théorie d'échelle de la localisation – transition métal isolant
- c) Interférences quantiques : effets de la température, du couplage spin-orbite, du champ magnétique.

B – Systèmes fortement corrélés et transitions de phases quantiques

1. Quelques modèles de systèmes fortement corrélés et discussion de leur complexité et leur symétries

2. Rappels sur les propriétés des transitions de phases classiques et brisure de symétrie

2. Transitions de phases quantiques, exemples en antiferromagnétisme et dans les cuprates.

3. Suzuki-Trotter est équivalence modèle quantique en D dimensions et modèle classique en D+1 dimensions

3. Théorie des champs en matière condensée : exemple sur la chaîne d'Ising en champ transverse

4. Fluctuations et théorème de Mermin-Wagner

Interactions électroniques fondamentales

Cet enseignement vise à présenter les bases de la théorie du problème à N-corps quantiques. Les applications choisies concernent des propriétés électroniques remarquables telles que le magnétisme, la conduction, les effets magnéto-résistifs etc. Le principal objectif est d'enseigner l'origine microscopique de ces propriétés et de rationaliser l'utilisation de modèles couramment employés en physique pour les décrire. Dans un premier temps, l'étudiant est familiarisé avec des méthodes monoélectroniques simples, puis il apprend à manipuler les interactions fondamentales du hamiltonien électronique exact. C'est dans ce contexte que sont présentées la corrélation électronique et certaines de ses implications en physique. Enfin, la théorie du groupe de renormalisation dans l'espace réel est appliquée à des systèmes simples dans le but de faire un lien entre les échelles microscopiques et macroscopiques.

I. Rappels d'atomistiques et descriptions orbitales : de l'atome d'hydrogène à la molécule, de la molécule aux systèmes étendus dominés par la délocalisation.

- a) Atomes : orbitales atomiques- Règle de Klechkowski- Règle de Hund
- b) Molécules : approximation de Born Oppenheimer, théorème du Viriel
- c) Théorie des orbitales moléculaires : modèle de Hückel
- d) Equivalence des descriptions localisées et délocalisées.
- e) Corrélation structure électronique- structure géométrique : diagramme de Walsh et effet Jahn Teller

Applications : Hückel dans les réseaux bi-partites, théorème du miroir et notion de gap n Hückel. Propriétés de conduction dans les nanotubes..

II. Le hamiltonien électronique exact et ses interactions : l'ab initio

- a) Déterminant de Slater- Règles de Slater
- b) Intégrales coulombiennes, intégrales d'échange –Energie d'un déterminant
- c) La matrice hamiltonienne en base minimale, en base étendue.
- d) Approximation monoréférentielle : la méthode Hartree Fock (SCF) et ses limites

Applications : Energie cinétique versus énergie électrostatique dans les complexes métalliques- – règles de Hund dans les complexes métalliques. Compétition entre états bas-spin et haut-spin dans les complexes à transition de spin.

III. Introduction à la corrélation électronique

- a) Approches multiréférentielles (MRSCF et CASSCF) : introduction à la corrélation électronique non dynamique
- b) Méthode d'interaction de configurations tronquées: introduction à la corrélation électronique dynamique
- c) Théorie des variations et des perturbations dans le contexte du problème à N-corps quantiques

Applications : Dissociation de H_2^- formes neutres et ioniques. Traitement perturbatif de l'effet des formes ioniques sur les formes neutres. Corrélation dynamique et relaxation des formes ioniques.

IV. Modèles utiles en physique : de la délocalisation à la corrélation

- a) Méthodes de Hubbard : détermination des interactions du modèle à partir du hamiltonien électronique exact. Gap de charge et propriétés de conduction.
- b) Limite fortement corrélée : le hamiltonien de Heisenberg. Gap de spin et propriétés magnétiques.
- c) Diagramme de Mott : régimes non corrélé (Hückel) et fortement corrélé (Heisenberg)
- d) Délocalisation dans les systèmes corrélés : le modèle de double échange et les effets de magnéto-résistance.

Applications : détermination des couplages magnétiques dans un système de spin $S=1$ (nickélates) à partir de calculs ab initio. Extraction d'un modèle t-J dans les systèmes de spin $\frac{1}{2}$ (cuprates dopés supraconducteurs).

V. Du microscopique au macroscopique : la théorie du groupe de renormalisation dans l'espace réel avec interactions effectives

- a) Théorie des hamiltoniens effectifs
- b) Théorie du groupe de renormalisation dans l'espace réel
- c) Limites du RSRG illustrées dans le cas de la méthode de Hückel
- d) Interactions effectives et renormalisation

Applications : Etude des gaps dans les chaînes de spin : points attractifs, répulsifs et transition de phase. De l'ab initio aux propriétés collectives avec une méthodologie unique.

Théorie des groupes et dynamique quantique

Ce cours introduit la symétrie des groupes ponctuels et ses applications en dynamique quantique moléculaire pour des physiciens n'ayant abordé la mécanique quantique que par la physique atomique. Ce cours de tronc commun est introductif pour l'option **Dynamique moléculaire et Processus d'interaction** et certains concepts de base sont également partagés avec le cours de **Interactions électroniques fondamentales**.

I. Introduction.....

II. Symétrie des groupes ponctuels

- A. base mathématique (ordre, caractère, classe, représentation irréductible)
- B. représentation réductible dans une représentation irréductible (symboles de Mulliken)
- C. Opérateur de projection
- D. Produit direct (générer des tables de symétrie, décomposition du produit direct).....
- E. Corrélation et Réduction de symétrie

III. Cas simple = Les molécules diatomiques.....

- A. Dynamique moléculaire quantique.....
 - 1. retour sur la séparation de Born-Oppenheimer, surfaces diabatiques/adiabatiques, couplages cinétiques ("non-adiabatiques")
 - 2. symétrie cylindrique, par opposition à la symétrie sphérique des atomes
 - 3. symétrie u et g
- B. symétrie des états vibrationnels et rotationnels des diatomiques.
- C. règles de sélection en spectroscopie basées sur la symétrie
- D. Autres couplages: spin-moments -SO

IV. Les molécules polyatomiques

- A. Symétrie des orbitales moléculaires à partir des orbitales atomiques
- B. Symétrie des états électroniques (transition électronique)
- C. Symétrie des états vibrationnels et vibroniques (modes normaux, spectroscopie IR, Raman)
- D. Tenseur de rotation.....
- E. Couplage électronique (couplage spin-orbite, effet Renner-Teller et effet Yarn-Teller)
- F. Photodissociation

Fondements de l'Interaction Rayonnement Matière.

Ce cours a pour but de donner aux étudiants les bases nécessaires à une bonne maîtrise des phénomènes résultant de l'interaction rayonnement matière. Il est particulièrement focalisé sur des systèmes atomiques interagissant aussi bien avec un champ classique qu'avec un champ quantique. Il complète ainsi les différents cours de M1 sur la matière en approfondissant les différents processus d'interactions.

Partie I : Régime semi-classique

Chapitre 1: Phénomènes optiques transitoires dans les systèmes à deux et trois niveaux :

Bases diabatique-adiabatique. Méthodes d'approximations. Etats de Floquet. Transitoires cohérents. STIRAP

Chapitre 2 : Phénomènes optiques stationnaires dans les systèmes à deux et trois niveaux :

Matrice densité. Equations de Maxwell-Bloch. Raie Homogène, inhomogène. Effets de saturation. Transitions à deux photons. Résonance noire. Transparence électromagnétique induite par laser.

Chapitre 3 : Forces radiatives :

Force dipolaire. Pression de radiation.

Partie II : Eléments d'Optique quantique

Chapitre 1 : Quantification :

Différents états du champ quantique. Relation d'incertitude phase-nombre de photons.

Chapitre 2 : Interaction atome-photon :

Différents Processus d'interaction (Absorption, Emission spontanée et stimulée). Théorie simplifiée de l'équation pilote. Atome habillé.

Applications de l'Interaction Rayonnement Matière

Les applications de l'interaction rayonnement matière sont vastes et nombreuses. Ce cours a pour but à travers des choix d'applications ciblées, d'étudier dans le détail certaines applications fondamentales comme les lasers ou d'autres ayant connus récemment des développements spectaculaires (refroidissement, interférométrie, électrodynamique en cavité).

Chapitre 1 : Lasers :

Cavités optiques, Modèle du laser, Différents types de fonctionnement.

Chapitre 2 : Refroidissement et piégeage laser :

Refroidissement Doppler, Sisyphé, Évaporatif. Piège Dipolaire, Magnéto-optique. Condensat de Bose-Einstein.

Chapitre 3 : Interférométrie atomique :

Effet Kapitza-Dirac,

Chapitre 4 : Cavités et photons :

Modèle de Jaynes-Cummings. Electrodynamique quantique en cavité. Micromaser

Rayonnement Quantique

Ce cours a pour but de donner une vision générale de l'interaction rayonnement matière en reliant l'aspect optique (basse énergie) et relativiste (haute énergie) de l'électrodynamique quantique. Il est aussi prévu de mettre l'accent sur la nature particulière du photon tel qu'il est révélé par des expériences clés de l'interférométrie.

Chapitre I : Nature du photon :

Propriétés du photon. Interférométrie en champ quantique. Expérience de Hanbury Brown and Twiss. Groupement et dégroupement de photons. Fonction d'onde du photon.

Chapitre II : Formulation covariante de l'électrodynamique quantique :

Quantification covariante. Limite non relativiste

Chapitre III : Etude du vide :

Polarisation du vide. Energie du vide. Effet Casimir.

Chapitre IV: Processus relativistes d'interactions entre électrons et photons :

Effet Compton. Rayonnement de freinage. Annihilation de paires électron-positron en deux photons

Développements Récents en Mécanique Quantique

Objectifs :

Donner une formation sur les développements récents théoriques et expérimentaux qui permettent d'implémenter les règles de la mécanique quantique dans des situations réalistes mais proches des "expériences de la pensée" abstraites issues du formalisme. Permettre aussi de comprendre les applications récentes de la mécanique quantique dans le cadre de l'information quantique.

Prérequis : connaissance de base de la mécanique quantique, et des outils mathématiques usuels associés.

Programme :

1. Théorie de la mesure
2. Systèmes quantiques complexes: le chaos quantique
3. Information quantique: téléportation, cryptographie quantique, algorithmes quantiques
4. Obstacles au contrôle des systèmes quantique: décohérence, imperfections
5. Etudes des ressources de l'information quantique; exemple de l'intrication, théorème de non-clonage
6. Exemples d'implémentations expérimentales: ions piégés, jonctions Josephson, atomes en cavité...
7. Résultats récents: tests avancés de la mécanique quantique, paradoxe EPR, variables cachées, inégalités de Bell

Magnétisme et Fluides quantiques

A - Magnétisme quantique

1. Mécanismes d'échange de spin : ferromagnétisme, antiferromagnétisme et super échange
2. Modèles de Hubbard et ses descendants : modèle de Heisenberg et modèle t-J
3. Quelques théorèmes exacts (Nagaoka, Lieb, Marshall, Lieb-Schultz-Mattis)
4. Phases magnétiques avec brisure de symétrie : théorème de Mermin-Wagner
5. Approximation des ondes de spin pour les phases ordonnées
6. Techniques expérimentales : diffraction et diffusion inélastique des neutrons, SR, RMN etc.

B - Fluides quantiques

1. Rappels sur quelques phases quantiques de la matière.
2. Applications de la seconde quantification à la condensation de Bose-Einstein (BEC) et à la superfluidité. Equation de Gross-Pitaevskii. Applications à ^4He .
3. Liquide de Fermi: approches phénoménologique et microscopique. Conséquences expérimentales.
4. Théorie microscopique (BCS) de la supraconductivité .
5. Phénoménologie de la supraconductivité (approche Ginzburg-Landau).
6. Illustration du lien BCS-BEC dans les expériences d'atomes froids.

Optique et transport dans les solides de basse dimension

Il s'agit à travers cet enseignement de donner un aperçu des propriétés électroniques, tant du point de vue de l'optique que du transport de charge ou de spin, qui ont émergé en physique de la matière condensée à travers l'essor des systèmes de dimension réduite. La réduction de dimensionnalité ainsi que les effets de confinement quantique induisent de profondes modifications des propriétés physiques qui nécessitent l'introduction de méthodes de description adaptées ainsi que de nouveaux concepts en physique de la matière condensée qui seront présentés dans ce cours.

A. Interaction rayonnement-nanostructure.

I. Etats électroniques confinés dans les solides

1. Discontinuités de bande, équation de la fonction enveloppe et conditions aux limites
2. Etats électroniques dans les nanostructures semiconductrices : puits quantiques, super-réseaux, fils et boîtes quantiques.

II. Propriétés optiques des nanostructures semiconductrices

1. Elément de matrice optique, règles de sélection
2. Transitions optiques entre états de valence et de conduction, entre sous-bandes ou sous niveaux de conduction : émission spontanée/stimulée.
3. Rôle de l'interaction coulombienne : excitons, plasma électron-trou
4. Couplage spin-orbite et orientation de spin par pompage optique.
5. Interaction cohérente avec le champ électromagnétique : contrôle cohérent, oscillations de Rabi.

III. Electrodynamique en micro-cavité

1. Modes optiques confinés
2. Couplage faible : Effet Purcell, application aux sources de photons uniques
3. Couplage fort : polaritons de micro-cavité.

B. Transport Electronique dans systèmes de basse dimension.

I. Descriptions semi classiques de la conductivité:

1. Equation de Boltzmann. Distribution hors équilibre. Application à l'effet thermoélectrique.
3. Conductivité des couches minces (modèle de Fuchs- Sondheimer).
4. Transport électronique dans le régime diffusif – Application à la GMR (modèle de Camley-Barnas).

II. Transport dans les systèmes mésoscopiques :

1. Transport quantique : Régime d'interférences quantiques / Localisation faible. Effet du champ magnétique / Effet Aharonov-Bohm. Fluctuations de conductance.
2. Régime tunnel : Transmission à travers la barrière. Calcul du courant tunnel cohérent. Résistance négative. Applications : Blocage de Coulomb. Transistor à 1 électron.
3. Régime balistique : Description de la conductance en termes de transmission. Formalisme de Landauer. Transport incohérent / Transport cohérent. Transport dans les nanotubes de carbone.

Dynamique moléculaire et processus d'interactions

1. Introduction

Généralités sur les processus étudiés.

Coordonnées et Hamiltoniens.

2. Théorie I : Méthodes dépendent du temps

Interaction rayonnement-matière, impulsions femtosecondes, les différentes représentations, méthodes de grille, méthodes spectrales et pseudo-spectrales.

La propagation : opérateur d'évolution, MCTDH

3. Théorie II : Traitements indépendants du temps

Equations couplées : méthodes de résolution.

Analyse asymptotique et changements de représentation.

4. Applications :

Processus dynamiques après excitation par une impulsion laser ultra-brève.

Processus inélastiques dans les collisions atomiques et moléculaires.

Dynamique de l'interaction des molécules avec des surfaces.

Structure électronique des molécules et des solides

1. Introduction : Méthodes ab initio standard et DFT, Comparaison des performances, limitations, etc

I- Théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

1. Dérivation de la DFT Théorèmes Hohenberg et Kohn :

Correspondance entre densité à une particule et potentiel extérieur, concept de Fonctionnelle et principe variationnel

N et V-représentabilité de la densité à une particule

La fonctionnelle de minimisation restreinte de Levy

Approximations de Thomas-Fermi et Thomas-Fermi-Dirac: Méthode Kohn-Sham

Théorème de Janak, état de transition de Slater

Théorie de la fonctionnelle de la matrice densité

Mise en place, solution des équations Kohn-Sham, différents types de base, stratégies numériques

2. Recherche de la fonctionnelle adaptée :

Des résultats correspondant à diverses observables (structures moléculaires, réactivité, structure de bande des systèmes périodiques) seront présentés au fur et à mesure de la présentation des différentes fonctionnelles.

Approximation X-alpha, électronégativité

Le gaz homogène d'électrons et l'approximation locale

Corrections de self-interaction

Fonctions de trou et fonctionnelles d'échange-corrélation

Propriétés d'échelle (scaling) d'une fonctionnelle

Fonctionnelles corrigées du gradient : échange, corrélation (GGA)

Fonctionnelles hybrides et connexion adiabatique

Fonctionnelles de troisième génération

3. Extensions vers la Physique

DFT et magnétisme de spin : l'approximation LSDA, les solides de métaux de transition, magnétisme non-collinéaire

Corrections relativistes

DFT et magnétisme orbitalaire: les problèmes de l'approximation LSDA, corrections phénoménologiques (OP, LSDA+U), fonctionnelle de la densité de courant, anisotropie magnétique

Effets des corrélations fortes: DFT sur un réseau, application au modèle de Hubbard, localisation et isolant de Mott

Dynamique de type Car-Parrinello

DFT et supraconductivité

Interactions van der Waals en DFT

II- Méthodes ab-initio de la chimie quantique :

1. Les langages de la Chimie Quantique et leur équivalence

2. Orbitales Moléculaires délocalisées:

Méthode Hartree-Fock et Théoreme de Koopmans; Etats excités

3. Orbitales Moléculaires localisées :

Etat fondamental de systèmes ioniques et covalents, excitations locales, pertinence et limites de la Mécanique Moléculaire

Séparabilité : pseudopotentiels de coeur, de groupe, traitements multipolaires pour les gros systèmes

4. Orbitales Atomiques (Valence Bond) :

Systèmes a valence mixte, systèmes magnétiques

5. Les Méthodes de calcul :

Les bases d'orbitales et le problème de la convergence des expansions finies (orbitales, déterminants)

Les méthodes mono et multi-déterminantales : la méthode SCF, la corrélation non-dynamique et le CAS-SCF

6. Introduction de la corrélation dynamique :

Perturbation: MP2, MR-PT2

Interaction de Configurations: CI-SD, MRCI

Coupled Cluster

Physique des Agrégats

La matière à l'échelle nanométrique possède des propriétés qui ne sont ni celles de la molécule ni celles du solide. Ce cours présente divers aspects de la physique des agrégats et leur spécificité : structure électronique et géométrique, dynamique et thermodynamique. Elle montre aussi les similarités entre certains aspects de la physique des agrégats et ceux rencontrés dans d'autres systèmes : verres, biomolécules, puits quantiques, systèmes de basse dimensionalité.

1- Introduction (2 heures)

Contexte général

Agrégats libres et supportés

Effets de taille finie : les agrégats entre la molécule et le solide

Formation et synthèse

Les agrégats comme prototypes de systèmes complexes

2. Structure électronique et géométrique (6 heures)

Introduction : rôle de la structure

Forces intermoléculaires

Approches de la structure électronique dans les agrégats

Stabilité électronique et géométrique dans les agrégats : métalliques simples, ioniques, moléculaires, covalents et fullerènes, métaux de transition

Exploration des surfaces de potentiel, modes normaux de vibration

Excitations électroniques dans les agrégats : excitations localisées ou collectives ; plasmons

Excitations vibrationnelles, agrégats quantiques

Transitions structurales

3. Thermodynamique (6 heures)

Description statistique des systèmes finis

Théories phénoménologiques

Thermodynamique des agrégats : coexistence dynamique, chaleurs spécifiques négatives

Analogies avec d'autres systèmes complexes : verres, biomolécules ...

4. Dynamique et réactivité (6 heures)

Dynamique aux temps courts : dynamique moléculaire, théorie de la fonctionnelle densité dépendant du temps, excitations brèves, analyse résolue en temps

Dynamique aux temps longs : théorie statistiques, équations cinétiques, dissociation thermique, relaxation vers l'équilibre

Méthodes numériques avancées

Cet enseignement est la suite naturelle du module de M1 - 2M7PY32: Méthodes numériques. Contrairement au module de M1, ce cours se concentre plus particulièrement sur la simulation des systèmes physiques complexes, c'est à dire comprenant un très grand nombre de degré de liberté.

1) Equations différentielles couplées à grand nombre de variables

- Dynamique moléculaire classique (algorithme de Verlet et généralisations).
- Dynamique moléculaire quantique à la Car-Parinello.

2) Intégration multidimensionnelle à grand nombre de variables:

- Utilisation des suites à discrétance faible (Quasi Monte Carlo)
- Algorithme de Metropolis généralisé (Monte Carlo)
- Algorithmes locaux (Biased Monte Carlo)
- Algorithmes globaux (algorithmes de Wolff-Swendsen-Wang)

3) Optimisation à grands nombres de variables.

- Méthodes locales
- Méthodes globales: Algorithmes génétiques, Recuit simulé classique, Recuit simulé quantique.

4) Diagonalisation de très grandes matrices:

- Algorithmes de Lanczos, Davidson, Olsen, etc.
 - Algorithme basé sur la matrice densité (DMRG)
- Méthodes probabiliste de diagonalisation : méthodes Monte Carlo quantique (QMC)

5) Méthodes de propagation du paquet d'onde

6) Au-delà des ordinateurs classiques: l'ordinateur quantique.

- Algorithme de tri de Grover.

Physique Statistique Hors d'Équilibre

L'objet de ce cours est de présenter de nombreux *exemples expérimentaux* de systèmes physiques qui sont *intrinsèquement hors d'équilibre*, et d'introduire les *méthodes théoriques et numériques* permettant de comprendre leurs propriétés. Ces systèmes couvrent des échelles temporelles et spatiales allant du microscopique (séparation de phase d'impuretés semiconductrices dans une matrice vitreuse), en passant par l'échelle « humaine » (agrégation de billes de polystyrène à la surface de l'eau, trafic routier,...), jusqu'aux échelles cosmologiques (agrégation des amas de galaxies).

1. Introduction

1.1 Exemples physiques : introduction de la notion d'invariance d'échelle

- Systèmes non-conservés : systèmes magnétiques (modèles d'Ising, XY (systèmes de cristaux liquides), mousses de savon (Potts), bulles magnétiques...).
- Systèmes conservés : mélanges binaires (métalliques, liquides), films de Langmuir, impuretés semiconductrices dans un verre...
- Phénomènes d'agrégation (bulles de polystyrène à la surface de l'eau, galaxies,...) ; monodispersité et polydispersité ; introduction des systèmes de réaction-diffusion $A+A \rightarrow 0$, $A+A \rightarrow A$, $A+B \rightarrow 0$.
- Transitions de phase dynamiques (DP, PC ; lien avec les systèmes de réaction-diffusion).
- Autres exemples de systèmes hors d'équilibre : dynamique d'interfaces, turbulence, trafic routier, finance, théorie des jeux (poker...), épidémiologie, feux de forêts, modèles de rivières...
- Dans tous ces exemples, la notion d'invariance d'échelle est illustrée visuellement et quantitativement via l'introduction des fonctions de corrélation spatio-temporelles (Ising, mélanges binaires...), des fonctions de distributions de masse (agrégation...), de taille (mousses de savon...), de taille d'intervalles (Ising 1d, réaction-diffusion 1d...), et des fonctions d'échelle (transitions de phases dynamiques...).

1.2 Introduction générale à la dynamique des systèmes physiques

- Équation maîtresse générale (condition de bilan détaillé...).
- Introduction des algorithmes Monte-Carlo principaux pour les systèmes hamiltoniens (vérification de la condition de bilan détaillé...) : simuler les systèmes physiques sur un ordinateur.
- Introduction au Monte-Carlo pour les systèmes irréversibles (illustration sur des modèles de réaction-diffusion).

2. Étude d'un Système Non-Conservé : le Modèle d'Ising

Dans cette partie, nous présenterons l'étude de la dynamique de retour à l'équilibre du modèle d'Ising, paradigme des systèmes dont le paramètre d'ordre n'est pas localement conservé. Après une illustration expérimentale et par des simulations numériques de ce type de systèmes, nous aborderons des méthodes théoriques qui permettent de comprendre leurs propriétés essentielles.

2.1 La dynamique de Glauber en $d = 1$ (étude complète : fonctions de corrélation, exposant λ ...)

2.2 Glauber en $d > 1$: champ moyen

2.3 Modèle A ($T=0$)

- Justification qualitative du Modèle A pour décrire la dynamique du modèle d'Ising.
- Solutions approchées : grand N , OJK, grand d ...

3. Étude des Systèmes Conservés

Cette partie est consacrée à la physique et notamment à la dynamique de la séparation de deux phases (exemple : vinaigre + huile dans la vinaigrette !).

3.1 Théorie de Lifschitz-Slyosov

3.2 Dynamique d'échange de spins (solution du modèle effectif à 1d)

3.3 Introduction rapide au Modèle B ($T=0$)

4. Modèles de Réaction-Agrégation-Diffusion

Cette partie introduit des éléments de dynamique réactionnelle avec des applications qui vont bien au-delà de la chimie (modèles de propagation d'opinions, d'épidémies ; modèles de trafic routier ; modèles de systèmes agrégatifs...). La notion de transition de phase dynamique sera introduite.

4.1 Modèles en $d = 1$

- $A+A \rightarrow A$: champ moyen et solution exacte ; champ moyen du modèle de Takayasu.
- $A+A \rightarrow 0$: champ moyen et IIA ; lien avec la dynamique de Glauber pour Ising (IIA pour la fonction de corrélation spatiale).
- Étude qualitative de $A+B \rightarrow 0$.
- Transitions de phases dynamique : champ moyen complet pour la percolation dirigée.

4.2 Équation de Schmoluchowski des systèmes agrégatifs

- Introduction de l'équation champ moyen et de la notion de noyau effectif de collision.
- Classification des noyaux de collision : monodispersité et polydispersité.