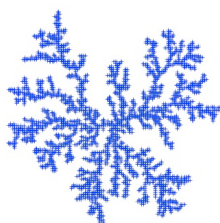

M1 : Physique Numérique – Liste des projets proposés

1 Croissance fractale

Une fractale est un objet dont la structure est invariante par changement d'échelle. Le terme a été créé par Benoît Mandelbrot en 1974. La croissance d'un agrégat fractal peut être simulé en utilisant le modèle d'agrégation limité par la diffusion (Diffusion Limited Aggregation), introduit par T.A. Witten and L.M. Sanders (1981). L'agrégat se forme à partir d'un germe initial sur lequel d'autres particules viennent s'agréger. Ces particules qui viennent depuis l'"infini" diffusent dans le système jusqu'à ce qu'elles s'attachent à l'agrégat en formation. L'objectif du projet sera d'obtenir la dimension fractale de l'agrégat.

[Autres projets possibles utilisant des marches aléatoires : mouvement Brownien, croissance de polymères.]

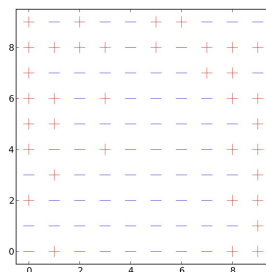


2 Modèle d'Ising 2D

Le modèle d'Ising est le modèle le plus simple du magnétisme. Il est dénommé d'après le physicien Ernst Ising (1900-1998). Le modèle 1D est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. La généralisation à 2 dimensions a été faite par Lars Onsager en 1944, mais la solution est très compliquée. Il n'existe pas de solution analytique en 3D. On considère un système de spins sur réseau. Chaque spin σ_i peut prendre 2 valeurs : +1 correspond à un spin "up" et -1 correspond à un spin "down". L'hamiltonien du système,

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i,$$

contient deux contributions : l'interaction entre premiers voisins et le couplage à un champ magnétique. On va considérer un réseau carré avec une interaction ferromagnétique ($J > 0$). L'objectif du projet sera d'étudier le diagramme de phase du système en fonction de la température et du champ magnétique par simulation de Monte Carlo.



Configuration de spins up (+) et down (-) sur un réseau 10×10 .

3 Etat fondamental de l'atome d'hélium

Dans le cadre de la mécanique quantique, l'atome d'hydrogène est un problème à deux corps analytiquement soluble. Un atome d'hélium consiste d'un noyau de charge $Z = 2$ plus deux électrons - donc il s'agit

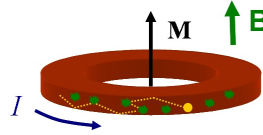
d'un problème à trois corps qui n'est pas analytiquement soluble. L'équation de Schrödinger du système s'écrit sous la forme

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_1}^2 - \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{r}_2}^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2),$$

où \mathbf{r}_i est la position de l'électrons $i = 1, 2$. En outre, $r_i = |\mathbf{r}_i|$ est la distances entre le noyau et l'électron i et $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ est la distance entre les deux électrons. On a choisi des variables adimensionnées : les énergies sont mesurés en unités de Hartree (1 Hartree = 2 Rydberg) et les distance sont mesurés en unités du rayon de Bohr. L'objectif du projet sera d'estimer l'énergie de l'état fondamental d'un atome d'hélium en utilisant la technique Monte Carlo quantique variationnelle.

4 Courant permanent dans un anneau mésoscopique

Un courant permanent est un courant électrique perpétuel qui nécessite pas de source d'alimentation externe. Il s'agit d'un effet de la mécanique quantique prédit en 1983 par M. Büttiker, Y. Imry et R. Landauer : Si un anneau mésoscopique est persé par un flux magnétique, le système peut porter un courant dans l'état fondamental. L'amplitude de ce courant est petite et difficile à mesurer. Pour l'observer, il faut que la longueur de cohérence de phase excède la circonférence de l'anneau. Les premières expériences sur les courants permanents datent de 1990 par un groupe de recherche à Bell Labs. De nouvelles expériences plus précises ont été exécutées en 2009 à Stanford et Yale. L'objectif du projet sera d'étudier le courant permanent dans un anneau unidimensionnel en fonction du flux, du nombre de particules et du désordre.



Anneau mésoscopique [Image : Wikipedia].

5 Propagation d'un paquet d'onde

Les idées de la mécanique quantique ont été développées tout au long du 20^{ème} siècle. Un des aspects centraux est la dualité particule-onde. Un système est caractérisé par sa fonction d'onde ψ . L'évolution de la fonction d'onde est contrôlée par l'équation de Schrödinger,

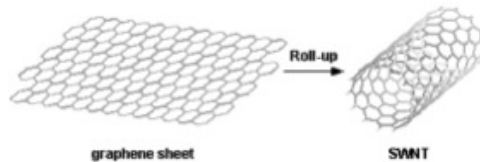
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x) \right) \psi(x, t) = i\hbar\partial_t\psi(x, t).$$

Une solution analytique est connue seulement dans quelques cas simples. L'objectif du projet sera d'étudier numériquement l'évolution d'un paquet d'onde, c'est-à-dire, sa propagation et son étalement, dans un puits infini. La propagation de paquets d'ondes dans la mécanique quantique est directement liée à la propagation de densités de probabilité de la diffusion.

[Variations possibles : propagation dans un potentiel harmonique.]

6 Densité d'états d'un nanotube de carbone

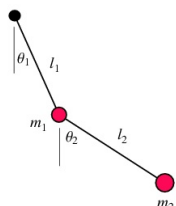
Les nanotubes de carbone ont été découverts par S. Iijima en 1991 – bien avant la découverte du graphène. Les nanotubes ont un potentiel applications considérable à cause de leurs propriétés mécaniques et électroniques remarquables : ce sont des matériaux très résistants et durs qui possèdent une conductivité électrique et thermique élevées. Un nanotube de carbone monofeuillet consiste d'une couche de graphène enroulé selon un certain axe. L'axe d'enroulement détermine la chiralité du nanotube et, par la suite, les propriétés électroniques : selon la chiralité, le nanotube peut être soit semiconducteur, soit métallique. L'objectif du projet sera de calculer la densité d'états de nanotubes de carbone de différentes chiralités et d'établir le lien entre la chiralité et le fait que le nanotube soit semiconducteur ou métallique.



7 Pendule double

La théorie du chaos traite des systèmes dynamiques qui, bien que déterministes, ne sont pas prédictibles sur le long terme à cause de leur extrême sensibilité aux conditions initiales. Des phénomènes chaotiques s'observent dans beaucoup de systèmes différents, dont le pendule double. Un pendule double consiste d'un premier pendule de longueur l_1 et masse m_1 auquel est attaché un deuxième pendule de longueur l_2 et masse m_2 . Ce système relativement simple a pourtant une dynamique chaotique. L'objectif du projet sera de simuler le mouvement du pendule double.

[Variations possibles : pendule simple amorti et forcé.]



8 Modélisation d'une station de ski/centre commercial/...

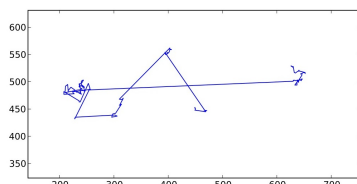
Pour optimiser l'emplacement de remontées mécaniques dans une station de ski ou de sorties de secours dans un centre commercial, il faut connaître la répartition de la population dans le domaine. Un modèle peut être construit sur la base de chaînes de Markov. Un processus de Markov est un processus sans mémoire : l'évolution du système dépend seulement de son état actuel et non pas de son histoire. Une chaîne de Markov est une suite des états successifs du système construits à partir d'une matrice de passage : $X_{n+1} = \Pi X_n$. L'objectif du projet est de modéliser la distribution de personnes dans une station de ski ou un centre commercial. On va supposer que le déplacement des personnes dépend seulement de l'endroit où elles se trouvent actuellement et qu'on peut associer des probabilités aux différents choix possibles.



Plan des Sept Laux.

9 Recherche de nourriture par marche de Lévy

Le terme marche ou « vol » de Levy a été inventé par Benoît Mandelbrot et se réfère au mathématicien Paul Pierre Lévy (1886-1971). La recherche de nourriture de certains animaux peut être modélisé par une marche de Lévy : la direction de chaque déplacement est choisie arbitrairement tandis que sa longueur l obéit à une loi de distribution $p(l) \propto l^{-\alpha}$ avec $1 < \alpha < 3$. La marche s'arrête quand l'animal a trouvé la nourriture, c'est-à-dire quand il s'est rapproché jusqu'à une distance relativement faible. L'objectif du projet sera de trouver la valeur de α optimale.



Exemple d'un vol de Lévy.

10 Ecosystème prédateurs-proies

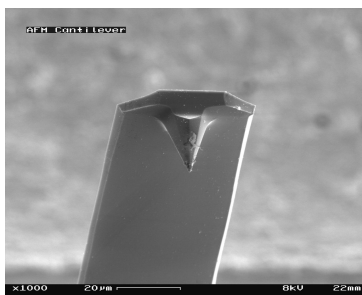
Une des interactions fondamentales en écologie est celle des prédateurs et des proies. Le premier modèle pour la dynamique de ces deux populations a été proposé par Lotka et Volterra au début des années 1930. Soit P le nombre des prédateurs et N le nombre des proies dans l'écosystème. La dynamique des deux populations peut être modélisé par les équations suivantes :

$$\frac{dN}{dt} = \alpha N - \beta NP, \quad \frac{dP}{dt} = \gamma NP - \delta P.$$

α est le taux de croissance naturel des proies en l'absence des prédateurs. La présence des prédateurs cause la disparition des proies, proportionnellement au nombre de prédateurs et de proies, d'où le terme en $-\beta NP$ dans la première équation, β étant l'efficacité de la chasse. Dans l'équation qui régit la dynamique des prédateurs, nous voyons que la croissance est fonction du nombre de proies disponible, et le terme δ est le taux de mort naturel des prédateurs. L'objectif du projet sera d'étudier la dynamique des deux populations pour différentes conditions initiales.

11 Modélisation d'une pointe AFM

Un microscope à force atomique (AFM = atomic force microscope) est une sonde locale qui permet l'étude des surfaces de matériaux conducteurs ou isolants à l'échelle atomique. Son principe de fonctionnement se base sur les interactions électromagnétiques entre la pointe AFM montée sur un microlevier et l'échantillon. L'objectif du projet sera de modéliser les forces entre la pointe et une surface métallique.



Pointe AFM [Image : Wikipedia].

12 Courant à travers une molécule

L'électronique moléculaire consiste à utiliser des « briques » moléculaires pour la fabrication de composants électroniques. Le concept a suscité beaucoup d'intérêt en vue de la réduction de la taille des circuits électroniques. La conductance est la quantité de base pour caractériser les propriétés électroniques d'un système. Est-ce que le système est un conducteur ou un isolant ? Si on considère un système à l'échelle nanométrique, la conductance permet de sonder les niveaux discrets du système. L'objectif du projet sera d'étudier la conductance d'une molécule connectée à deux électrodes.