



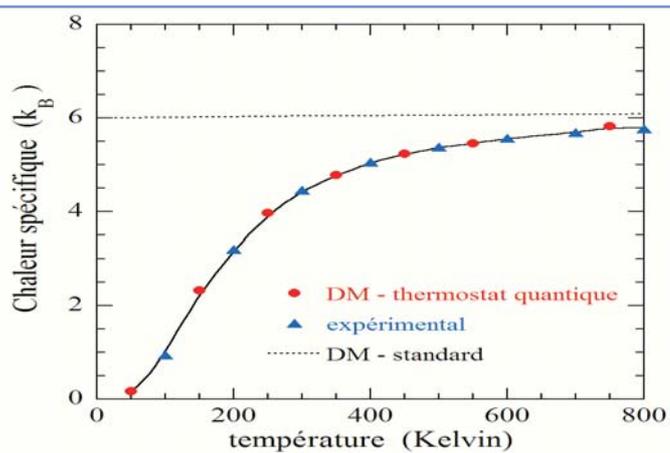
### Simuler des comportements quantiques en utilisant la mécanique classique

La technique de la Dynamique Moléculaire (DM) est un outil puissant de simulation numérique permettant notamment d'étudier les propriétés de la matière condensée. Il est admis depuis longtemps que son utilisation est limitée aux hautes températures puisqu'elle repose sur les équations de la mécanique classique.

Un thermostat quantique universel vient d'être proposé afin de prendre en compte les statistiques quantiques dans le cadre de la DM. La méthode s'applique à toutes les températures et quel que soit le modèle de cohésion utilisé : potentiel interatomique phénoménologique ou bien description *ab initio*. Ce thermostat nous a permis de retrouver la dépendance en température de l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique quantique, mais aussi de reproduire le comportement expérimental du coefficient de dilatation thermique et de la chaleur spécifique d'un cristal et enfin de retrouver l'état liquide de l'hélium non-superfluide à basse température, là où la DM standard prédit une phase solide.

Cette méthode est le fruit d'une collaboration entre chercheurs de l'Ecole Centrale Paris, de l'Institut d'Optique et du CEA. Elle devrait jouer un rôle important dans le domaine de la simulation. Par exemple, la combinaison de l'approche Car-Parrinello et de ce thermostat devrait fournir une technique intéressante incluant les effets quantiques des électrons et des noyaux.

H. Dammak  
M. Hayoun  
01 69 33 45 33



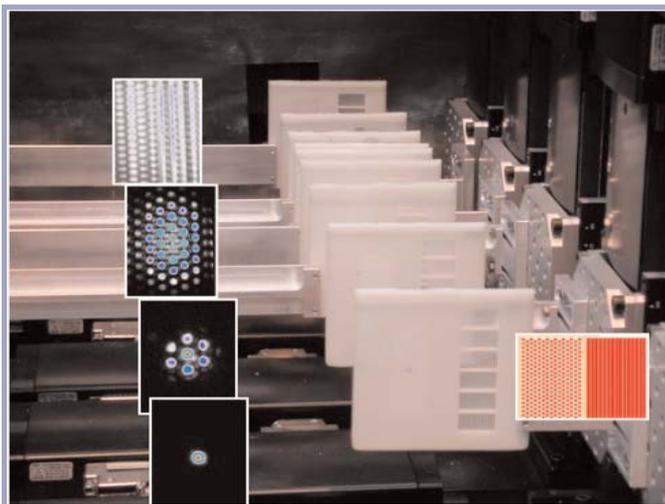
Evolution de la capacité calorifique d'un cristal de MgO en fonction de la température. Les valeurs obtenues à l'aide du thermostat quantique sont en accord avec les données expérimentales, alors que les résultats de la DM standard ne sont valables qu'au-dessus de 940K.



### Du nouveau dans la diffusion de Neutrons aux Très Petits Angles au LLB.

Le nouveau spectromètre qui vient d'être ouvert aux expérimentateurs du LLB bénéficie d'une conception originale. L'élément le plus novateur est son collimateur multi-faisceaux composé d'un ensemble de 13 masques absorbant les neutrons. Chaque masque possède deux types de diaphragmes : 600 trous circulaires de 1.5 à 0.6 mm de diamètre et 15 fentes de 1.5 à 0.6 mm de largeur. Leur rôle est de sélectionner, parmi tous les faisceaux de neutrons possibles issus des différents diaphragmes, uniquement ceux convergeant à un même endroit sur le détecteur placé à plusieurs mètres de l'échantillon. Tirant partie de la haute résolution d'une série de petits diaphragmes et de l'intensité de 600 faisceaux, on améliore d'un facteur 10 la résolution obtenue classiquement en diffusion des neutrons aux petits angles, avec des vecteurs de diffusion aussi petits que  $2 \cdot 10^{-3} \text{ nm}^{-1}$ . On comble ainsi la gamme entre les domaines accessibles par la diffusion des neutrons et celle de la lumière, pour observer des structures organisées à des échelles comprises entre 50 et 500 nm telles que : polymères ramifiés, systèmes moléculaires organisés (vésicules par exemple), caoutchoucs renforcés, membranes cellulaires en biologie, argiles, systèmes poreux, ciments, alliages en métallurgie...

A. Brûlet (2/66 69)  
S. Désert (2/64 76)



Photographie de 9 masques du collimateur multi-faisceaux de TPA. A droite, la représentation schématique d'un masque avec les deux systèmes de collimation : petits diaphragmes et fentes fines. A gauche, superposées quelques images des faisceaux incidents obtenus en ajoutant de plus en plus de masques : un seul faisceau est obtenu lorsque les 13 masques sont correctement positionnés.

