

Ecole thématique 23-28mai 2008 lors des JDN16 à Albé
« La Diffusion inélastique des neutrons pour l'étude des excitations dans la matière condensée : des notions fondamentales aux avancées récentes »
Organisation des Cours : Contenu et Intervenants

Bloc 1 : Introduction du sujet et rappel des formalismes.

Helmut Schober (ILL - Grenoble) et Stéphane Raymond (CEA - Grenoble)

Partie 1 : Phonons et vibrations : les atomes bougent.

Contenu : pourquoi étudier les mouvements atomiques ?

Lien microscopique/macrosopique (relation énergie-température), thermodynamique, expansion thermique, conductivité thermique, conductivité électrique, transport ionique, transition de phase structurale et transformation chimique, Supra BCS.

Formalisme : introduction du formalisme mathématique qui permet de traiter des vibrations moléculaires et des phonons (approximation de Born-Oppenheimer, approximation harmonique, seconde quantification, phonons, courbes de dispersion, densité d'état) ; anharmonicité, durée de vie des phonons etc...

Partie 2 : Propriétés électroniques et magnétisme

Contenu : magnétisme et propriétés électroniques

Magnétisme itinérant : théorie de Stoner : rôle de la répulsion coulombienne, de la structure de bande, du vecteur d'onde de Fermi, des propriétés d'emboîtement de la surface de Fermi : excitations individuelles et collectives dans le cadre de la RPA. Contribution à C_v , γ , ...

Magnétisme localisé : origine physique de l'échange, théorie des ondes de spin, dispersion, contribution à C_v ...

Magnétisme des terres rares : moment cinétique orbital et moment cinétique de spin excitations de champ cristallin.

Bloc 2 : Neutronique

Helmut Schober (ILL - Grenoble), Stéphane Raymond (CEA - Grenoble) et Fernande Moussa (LLB - Saclay)

Partie 1 : Interaction Nucléaire

Contenu : Calcul de la fonction de diffusion $S(Q, \omega)$.

Règle d'or de Fermi, pseudo-potentiel de Fermi, contributions cohérente et incohérente. Prise en compte du mouvement des atomes en décomposant la fonction de diffusion en une partie élastique, et une partie inélastique à « un phonon » et multiphonons. On parle enfin de densité d'états, d'approximations incohérentes et de ses limitations, de la susceptibilité, du facteur de Debye-Waller.

Partie 2 : Interaction magnétique

Contenu : Contribution magnétique à la fonction de diffusion.

Interaction magnétique neutron/spin des électrons non appariés, rôle de la polarisation des neutrons, facteur de forme, facteur géométrique, fonction de corrélation spin-spin et susceptibilité dynamique. Termes croisés nucléaires – magnétiques. Forme de la fonction de corrélation dans le cas des ondes de spin, des excitations de champ cristallin et du magnétisme itinérant.

Bloc 3 : Simulations

Partie 1 : Phonons et vibrations

Contenu : Introduction à la DFT (après une introduction rapide des méthodes plus anciennes et plus classiques). Calcul des quantités accessibles par l'expérience. Eventuellement, description de simulations complètes d'expérience.

Partie 2 : Magnétisme : les ondes de spin

Intervenants : **Sylvain Petit (CEA - LLB Saclay)**

Contenu : TP de simulation des ondes de spin sur ordinateur, en complément des cours des blocs 1 et 2. De l'hamiltonien de Heisenberg jusqu'au calcul de la fonction de corrélation spin-spin : dispersion des ondes de spin, facteur de forme, facteur géométrique.

Partie 3 : Les TP sur ordinateur

⇔ **Mark Johnson, Stéphane Rols, Sylvain Petit**

Bloc 4 : Quelles techniques en complément de la diffusion neutronique ?

Partie 1 : Les vibrations et les phonons.

Intervenants : **François Guillaume (ISM -Bordeaux)**

Contenu : Lien et complémentarité entre la diffusion inélastique des neutrons et la spectroscopie Raman, Infrarouge, la diffusion Brillouin.

Grandes lignes du principe de ces techniques (interaction rayonnement-matière), domaine accessible en (Q,w), règles de sélection et méthodes d'analyse pour l'attribution des raies spectrales. Ce cours se servira d'exemples (cristaux inorganiques et moléculaires) comme fil conducteur.

Partie 2 : Magnétisme.

Intervenant : **Matteo d'Astuto (IMPMC - Paris VI)**

Contenu : Lien et complémentarité entre la diffusion inélastique des neutrons et la diffusion inélastique des rayons X

Bloc 5 : Les Techniques expérimentales

Partie 1 : Les 3 axes et les filtres analyseurs.

Intervenants : **Bernard Hennion et Stéphane Pailhès (LLB - Saclay)**

Contenu : Description pratique de la mesure, principe de fonctionnement du spectromètre 3 axes, spectromètres typiques sur source chaude, froide ou thermique.

Fonction de résolution, conséquences pour le choix de la source, des filtres, des collimations ... Analyseurs et monochromateurs focalisants : influence sur la résolution et les choix expérimentaux. Cas particulier du fonctionnement type IN1+filtre Be

Partie 2 : Les Techniques Time Of Flight.

Intervenants : **Jacques Ollivier (ILL - Grenoble) et Jean Marc Zanotti (LLB - Saclay)**

Contenu : Description de la technique

disk chopper spectrometers, crystal-chopper time focusing spectrometers, spectromètres TOF sur sources continue et à spallation, géométries directe/indirecte, etc ...

Bloc 6 : Exemples scientifiques.

Alors que les premiers cours se veulent plutôt techniques, ce dernier « bloc » propose des exemples basés sur des thématiques précises et variées. Ces interventions se doivent d'être accessibles à tous ; en aucun cas elles ne doivent ressembler à un exposé de conférence. Un effort pédagogique est indispensable pour qu'elles fournissent l'occasion de reprendre dans le cadre d'un thème de recherche particulier, les notions présentées par les premiers intervenants.

E1 : Fullerènes et Nanotubes de carbone [S. Rols (ILL - Grenoble) / J. Cambedouzou (LPS – Paris XI)]

E2 : Excitations localisées – Vibrations dans des « cages » [Hannu Mutka (ILL - Grenoble)]

E3 : Catalyse localisée [Hervé Jobic (IRCE - Lyon)]

E4 : Les Clathrates hydrates : [Arnaud Desmedt, ISM Bordeaux]

E5 : Transitions de phase structurales – modes mous – Quasicristaux – Phases incommensurables [Roland Currat (ILL - Grenoble)]

E6 : Aimants moléculaires [Grégory Chaboussant (LLB - Saclay)]

E7 : Supraconductivité [Stéphane Pailhès (LLB - Saclay)]

E8 : Magnéto-résistance géante [Martine Hennion / Fernande Moussa (LLB - Saclay)]

	Vendredi	Samedi	Dimanche	Lundi	Mardi	Mercredi
9h00		9h00-10h30 Bloc 3 <i>Simulation1</i> <i>cours 1h30</i>	9h00-10h30 Bloc 5 <i>Instruments 1</i> <i>cours 1h30</i>	9h00-10h30 Bloc 4 <i>Tech. Compl. 2</i> <i>cours 1h30</i>	9h00-10h00 E5 R. Currat	9h00-9h30 Exposé 1
10h00						9h30-10h00 Exposé 2
		Pause	Pause	Pause	10h15-11h15 E2 H. Mutka	10h00-10h30 Exposé 3
11h00		11h00-12h30 Bloc 2 <i>Neutronique 1</i> <i>cours 1h30</i>	11h00-12h30 Bloc 4 <i>Tech. Compl. 1</i> <i>cours 1h30</i>	11h00-12h00 E7 S. Pailhes		11h00-12h00 Prix de thèse
12h00	12h00-15h00 Accueil Inscriptions			Affiches	11h30-12h30 E4 A. Desmedt	12h00-12h30 Bilan
	Buffet	Repas	Repas	Repas	Repas	Repas
14h00		14h00-15h30 Bloc 2 <i>Neutronique 2</i> <i>cours 1h30</i>	14h00-15h00 E1 S. Rols J. Cambedouzou		14h00-15h00 E8 F. Moussa M. Hennion	
15h00	14h00-15h30 Bloc 1 <i>Introduction 1</i> <i>cours 1h30</i>	Pause	Pause	L I B R E	15h15-16h15 E6 G. Chaboussant	
16h00	Pause	16h00-17h30 Bloc 3 <i>Simulation 2</i> <i>cours 1h30</i>	15h30-17h00 Bloc 5 <i>Instruments 2</i> <i>cours 1h30</i>			
17h00	14h00-15h30 Bloc 1 <i>Introduction 2</i> <i>cours 1h30</i>	16h00-18h30 Bloc 3 <i>Simulation</i>				16h45-17h45 E3 H. Jobic
18h00	Apéritif-affiches	TP	Questions - Réponses			
19h00			Dîner	18h30-19h00 Questions / Réponses	18h30-19h00 Questions / Réponses	
	Dîner	Dîner		Dîner	Dîner	
20h00						
		20h30-22h30 Bloc 3 <i>Simulation</i>	20h30... Affiches	20h30... Affiches		
21h00	21h00... Clips et affiches	TP	<i>TP accès libre</i>	<i>TP accès libre</i>	<i>TP accès libre</i>	
22h00						

Contacts :

Nom	Labo	email
Cambedouzou Julien	LPS Orsay	cambedouzou@lps.u-psud.fr
Chaboussant Gregory	LLB Saclay	gregory.chaboussant@cea.fr
Currat Roland	ILL Grenoble	currat@ill.fr
D'Astuto Matteo	IMPMC Paris VI	matteo.dastuto@impmc.jussieu.fr
Desmedt Arnaud	ISM Bordeaux	a.desmedt@ism.u-bordeaux1.fr
Guillaume François	ISM Bordeaux	f.guillaume@ism.u-bordeaux1.fr
Hennion Bernard	LLB Saclay	bernard.hennion@cea.fr
Hennion Martine	LLB Saclay	martine.hennion@cea.fr
Jobic Hervé	IRCE Lyon	herve.jobic@ircelyon.univ-lyon1.fr
Johnson Mark	ILL Grenoble	johnson@ill.fr
Moussa Fernande	LLB Saclay	fernande.moussa@cea.fr
Mutka Hannu	ILL Grenoble	mutka@ill.fr
Ollivier Jacques	ILL Grenoble	ollivier@ill.fr
Pailhès Stéphane	LLB Saclay	stephane.pailhes@cea.fr
Petit Sylvain	LLB Saclay	sylvain.petit@cea.fr
Raymond Stéphane	CEA Grenoble	raymond@ill.fr
Rols Stéphane	ILL Grenoble	rols@ill.fr
Schober Helmut	ILL Grenoble	schober@ill.fr
Zanotti Jean-Marc	LLB Saclay	jean-marc.zanotti@cea.fr
