

## Préface

Le neutron est une particule sans charge, et son interaction avec les électrons d'un système non magnétique peut en général être négligée. Par contre le neutron est diffusé par les noyaux atomiques par le biais d'une interaction faible, dont la section efficace de diffusion correspondante est connue avec précision pour chaque atome. Ainsi, en connaissant les trajectoires atomiques d'un système, on peut calculer son profil spectral complet  $S(Q,\omega)$  et le comparer directement avec le résultat d'une expérience de diffusion de neutrons : la comparaison entre données expérimentales et numériques permet une analyse plus profonde de la structure et de la dynamique de systèmes toujours plus complexes. La façon dont les expérimentateurs peuvent utiliser les outils modernes de simulation numérique pour mieux comprendre leurs données était le thème de l'école des JDN18, qui s'est déroulée à Rémuzat dans la Drôme Provençale en juin 2010. Les articles présentés dans ce volume sont issus des cours dispensés durant cette école.

Les trajectoires atomiques peuvent être obtenues à partir de calculs d'énergie totale du système, donnant aussi les forces et donc les accélérations exercées sur les atomes et permettant l'intégration des équations du mouvement. Le calcul le plus simple est basé sur des expressions analytiques (champs de force) d'interactions inter-atomiques, bien décrites par l'image de ressorts entre atomes, à laquelle il est nécessaire de rajouter les interactions électrostatiques et de Van der Waals sur les plus longues distances. Par la méthode des champs de force, il est possible de simuler des systèmes de plusieurs centaines de milliers d'atomes sur des *clusters*, d'une taille et capacité communément accessible dans des laboratoires de recherche d'aujourd'hui, l'échelle de temps pouvant s'étendre jusqu'aux microsecondes en faisant un compromis entre la taille du système et le nombre de pas de simulations. Ces échelles temporelles et spatiales ont un recouvrement presque entier avec celles couvertes par la diffusion de neutrons. Seuls les systèmes les plus larges, étudiés par exemple par diffusion de neutrons aux petits angles, dépassent ces échelles et, dans ce cas, la description à l'échelle atomique devient moins pertinente. Des modèles encore plus simples, de type « gros grains », doivent alors être développés quasiment au cas par cas.

Si une description plus précise des interactions inter-atomiques est nécessaire, par exemple pour étudier la dispersion des phonons dans des systèmes de la matière dure, la structure électronique doit être prise en compte. Les méthodes basées sur la fonctionnelle de densité (DFT) donnent le meilleur compromis entre vitesse et précision, mais les échelles temporelles et spatiales sont respectivement limitées à quelques centaines de picosecondes et d'atomes. Les méthodes basées sur la structure électronique sont aussi indispensables pour les études numériques du magnétisme électronique en matière condensée, qui est sondé expérimentalement par le moment magnétique du neutron.

De nombreux codes standards sont disponibles pour des simulations par champs de force ou DFT, auxquels il sera fait référence dans beaucoup d'articles de ce volume. Même si ces programmes peuvent être utilisés comme des « boîtes à outil », donnant un accès simple et rapide aux simulations numériques, la façon dont les codes résolvent, par exemple, l'équation de Schrödinger, implémentent les principes de la thermodynamique sous-jacents à la dynamique moléculaire ou relient la matrice dynamique avec le calcul des modes normaux, doit être comprise par leur utilisateur. Ces questions primordiales sont abordées dans les premiers articles. Un point important pour les expérimentateurs est de pouvoir utiliser les résultats des simulations pour les comparer avec les observables mesurées par diffusion neutronique. Dans ce sens, deux articles présentent des programmes particulièrement utiles : le code PHONON et le code nMoldyn. Plusieurs articles illustrent ensuite comment les techniques et les programmes s'appliquent à différents systèmes, allant des systèmes magnétiques où la plus grande précision est requise aux solutions de polymères, où les échelles de temps et de taille imposent les approximations les plus fortes. Enfin, dans une expérience virtuelle, la simulation de l'échantillon est combinée avec

X

la simulation des trajectoires des neutrons à l'intérieur des instruments, permettant de mettre en évidence des artefacts expérimentaux comme la diffusion multiple ou la diffusion par l'environnement échantillon. Dans le futur, un « simulateur d'expérience de diffusion de neutrons » permettra de tester par avance la stratégie expérimentale, et ainsi d'optimiser l'utilisation du temps de faisceau.

**N. Malikova, M. Plazanet, M. Johnson**

DOI : 10.1051/sfn/201112000