

Conductivité thermique de l'hydrogène

La conductivité thermique de l'hydrogène a été évaluée à partir d'une méthode quantique dans un domaine thermodynamique pertinent pour la fusion par confinement inertiel. La conduction thermique joue en effet un rôle primordial dans la physique de l'allumage lorsqu'un phénomène de réactions thermonucléaires auto-entretenues prend forme. Cette approche microscopique a permis de jauger la validité des modèles de conductivité couramment utilisés dans l'élaboration d'expériences de fusion sur les lasers de type Mégajoule.

F. Lambert • V. Recoules • A. Decoster • J. Clérouin CEA – DAM Île-de-France
 M. P. Desjarlais Sandia National Laboratories, Albuquerque, USA

Sous les termes de fusion par confinement inertiel (FCI) se cachent l'atteinte de conditions thermodynamiques permettant la propagation d'une onde thermonucléaire au sein d'un mélange de deutérium (D) et de tritium (T). La mise en condition du mélange nécessite la maîtrise de phénomènes macroscopiques variés : mécanique des fluides, transfert d'énergie par le rayonnement électromagnétique, conduction thermique par les électrons ou physique nucléaire à travers les réactions de fusion. Les outils numériques de dimensionnement des expériences de ce domaine couplent ces différentes descriptions - sous l'intitulé d'hydrodynamique radiative - et se basent sur la physique atomique sous-jacente. Cette dernière intervient sous la forme de coefficients traduisant la réponse des matériaux aux perturbations mécaniques (équations d'état), radiatives (opacités) ou thermiques (conductivité).

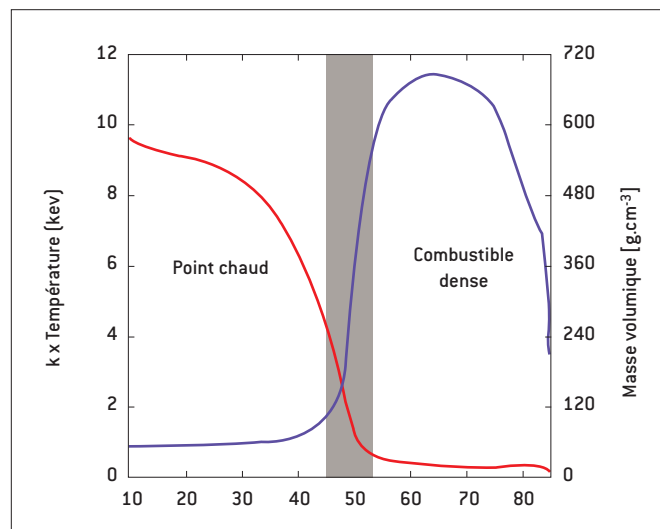
L'un des concepts élaborés pour la création de l'onde thermonucléaire est appelé allumage par point chaud. Après une compression quasi-isentropique d'une coquille solide de D-T, une petite quantité de combustible au centre de la cible est amenée à une masse volumique et une température suffisantes pour engendrer la fusion, créant ainsi un point chaud. Ce dernier sert d'allumette au système pour générer l'onde de combustion thermonucléaire qui va ensuite balayer l'édifice dense (figure 1). La naissance et la propagation des réactions de fusion sont dépendantes de plusieurs phénomènes dont deux, couplés, sont particulièrement importants : le ralentissement des noyaux d'hélium provenant des premières réactions et la conduction thermique électronique.

Celle-ci joue un rôle primordial dans la physique de l'allumage puisqu'elle est responsable du chauff-

fage du matériau dense en contact avec le point chaud permettant ainsi un dépôt d'énergie par les particules α efficace. Au sein de nos outils de simulation, la conduction thermique est décrite par une loi de Fourier dont la conductivité thermique doit être modélisée par la physique qui gouverne l'échelle microscopique. Plusieurs descriptions approximatives ont été proposées mais n'avaient pu, jusqu'à présent, être validées par des approches plus fondamentales.

L'une d'entre elles, la dynamique moléculaire quantique (DMQ) [1,2], permet de calculer les propriétés des matériaux en se basant sur la nature des atomes les constituant : les noyaux, particules classiques, sont couplés de manière cohérente à une description quantique de la structure électronique.

Figure 1. Profils de température et de masse volumique lors de la phase d'allumage. La zone grisée correspond au lieu où la conduction thermique est dominante.



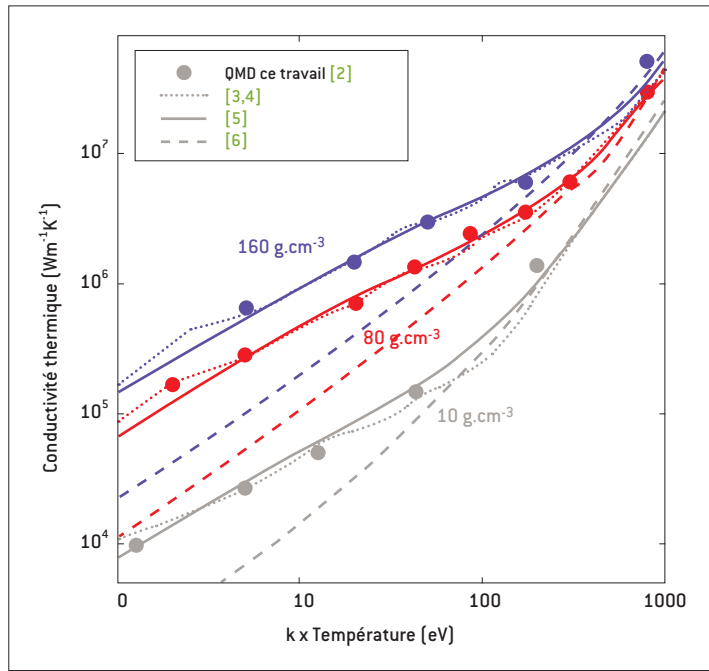


Figure 2.
 Comparaison des modèles de conductivité thermique avec les résultats de dynamique moléculaire quantique en fonction de la température et de la masse volumique.

Cette technique est largement utilisée pour décrire les propriétés de transport électronique dans des domaines thermodynamiques variés, allant de la matière comprimée à celle très détendue, et a déjà été mise à profit dans plusieurs thématiques d'intérêt pour le CEA comme les équations d'état ou les opacités.

La physique du point chaud est un sujet extrêmement difficile à aborder directement par la DMQ compte tenu des hautes températures requises. Ces dernières demandent de décrire les électrons par un nombre gigantesque d'états quantiques rendant les calculs extrêmement coûteux, y compris avec les machines parallèles actuelles. Afin d'avoir accès aux conditions thermodynamiques pertinentes, une seconde approche, dite sans orbitale, a été jointe à celle quantique. Cette méthode fournit une description approximative de la structure électronique, mais valable dans le régime thermodynamique du point chaud. Elle permet de calculer rapidement les positions des noyaux au cours du temps, injectées ensuite dans un code quantique – ABINIT – qui déduit de la structure électronique les coefficients de transport. Ceux-ci sont extraits du calcul à l'équilibre thermodynamique par l'intermédiaire d'une théorie perturbative. Atteindre des conditions aussi extrêmes de température et de masse volumique a cependant requis un effort de développement conséquent du code ABINIT.

Les conductivités thermiques ainsi obtenues sont comparées aux modèles existants dans les codes d'hydrodynamique radiative pour en jauger la validité (figure 2). Parmi les trois modèles étudiés, modèles couramment mis en œuvre en

FCI mais également en astrophysique, deux, dits de Hubbard-Spitzer [3,4] et d'Ichimaru [5] sont performants, mais un troisième, développé par Lee et More [6], s'est révélé erroné pour les températures les plus faibles.

Cette étude a permis de montrer que nos équipes avaient en leur possession une chaîne de calcul cohérente permettant de venir en soutien des simulations hydrodynamiques afin de valider les modèles approximatifs mis en jeu. Cette chaîne peut maintenant être utilisée dans d'autres domaines thermodynamiques tels que celui des instabilités hydrodynamiques des cibles de FCI, pénalisantes pour l'allumage et vis-à-vis desquelles la conduction thermique est une source de stabilisation.

RÉFÉRENCES

[1] V. RECOULES, F. LAMBERT, A. DECOSTER, B. CANAUD, J. CLEROUIN, « Ab initio determination of thermal conductivity of dense hydrogen plasmas », *Phys. Rev. Lett.*, 075002 (2009).
 [2] F. LAMBERT, V. RECOULES, A. DECOSTER, J. CLÉROUIN, M. DESJARLAIS, « On the transport coefficients of hydrogen in the inertial confinement fusion regime », *Phys. Plas.*, 056306 (2011).
 [3] W. B. HUBBARD, « Studies in stellar evolution .V. transport coefficients. », *Astrophys. J.*, **146**(3), p. 858-870 (1966).
 [4] L. SPITZER, R. HARM, « Transport phenomena in a completely ionized gas », *Phys. Rev.*, **89**(5), p. 977-981 (1953).
 [5] S. ICHIMARU, S. TANAKA, Theory of interparticle correlations in dense, high-temperature plasmas. V. Electric and thermal conductivities, *Phys. Rev. A*, **32**, p. 1790-1798 (1985).
 [6] Y. T. LEE, R. M. MORE, « An electron conductivity model for dense-plasmas », *Phys. Fluids*, **27**(5), p. 1273-1286 (1984).