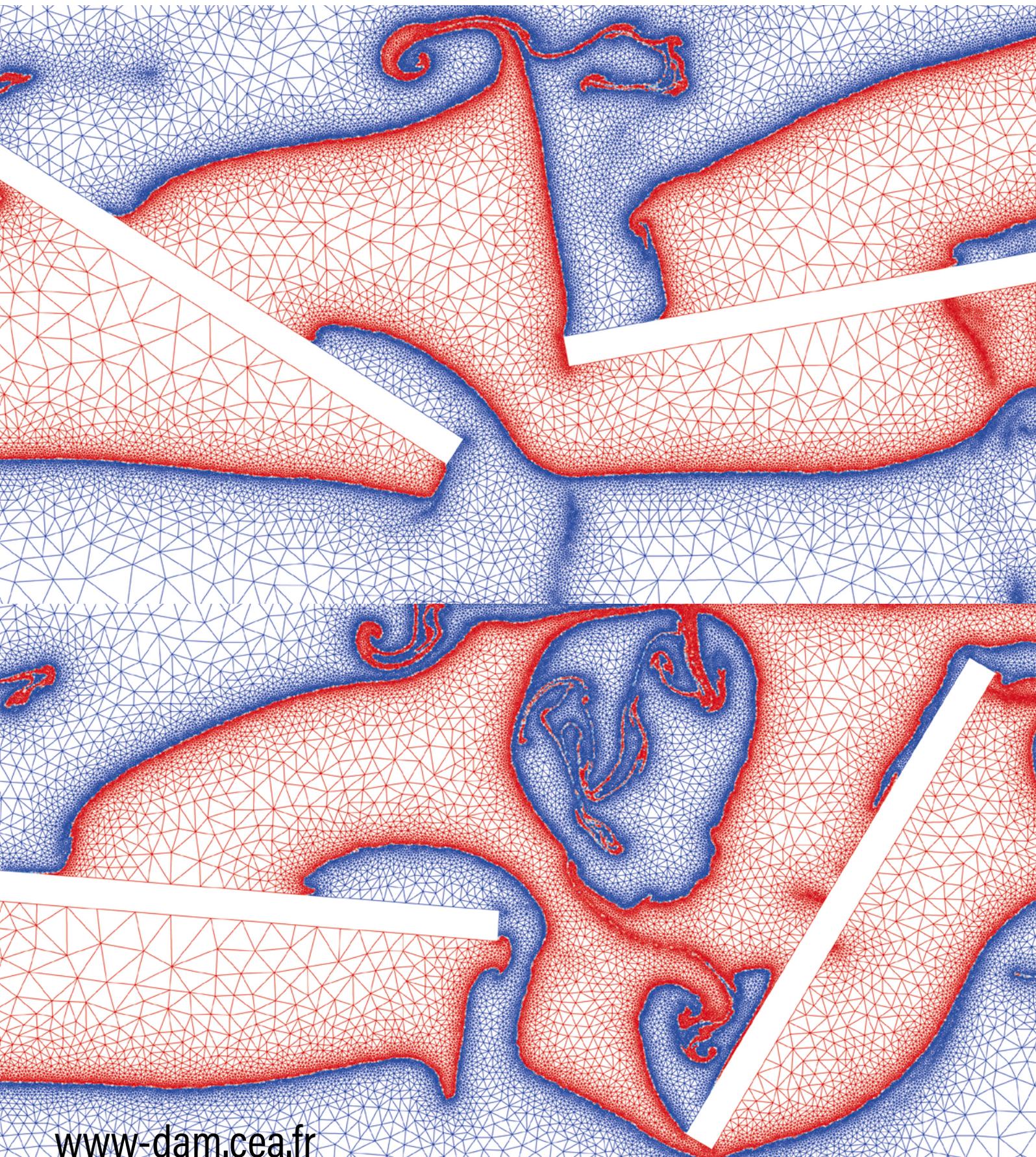
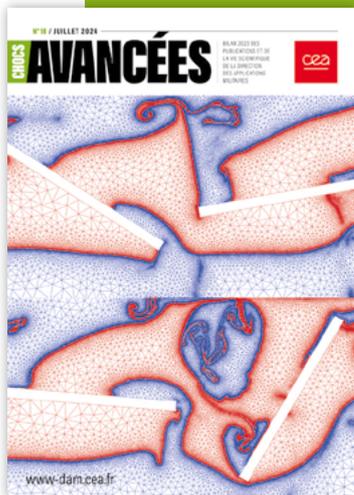


CHOCS **AVANCÉES**

BILAN 2023 DES
PUBLICATIONS ET DE
LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION
DES APPLICATIONS
MILITAIRES





N°18 / JUILLET 2024

AVANCÉES

EN COUVERTURE. Mélange de deux fluides à deux instants successifs (haut et bas), le mélange est généré par deux agitateurs tournants : simulation numérique avec une adaptation de maillage rendue possible par des progrès récents (voir article p. 52-53).

Bilan 2023 des publications et de la vie scientifique de la Direction des applications militaires

Commissariat à l'énergie atomique
et aux énergies alternatives

Directeur de la publication
Olivier Vacus

Coordinateur scientifique
Daniel Bouche

Comité scientifique
Nicolas Authier, Denis Autissier,
Christelle Barthet, Philippe Belleville,
Nathalie Blanchot, Daniel Bouche,
Serge Bouquet, Gilles Bourgès, Xavier Carlotti,
Patrick Carribault, Hélène Hébert,
Jean-Christophe Joly, Pierre-Henri Maire,
Jean-Luc Miquel, David Riz, Éric Royer,
Virginie Silvert, Christophe Thiébaud,
Stéphanie Thiébaud, Éric Van Renterghem

Rédacteur en chef
Jean-Marc Laborie

Création, réalisation et impression
EFIL / www.efil.fr

Conformité
Régine Regnault

Correction
Stylience / www.stylience.fr

Diffusion et abonnement
Régis Vîzet

Photo de couverture
© Cadam

AVANCÉES
CEA/DAM
Institut supérieur des études nucléaires
de défense (ISENDé)
Bruyères-le-Châtel,
F-91297 Arpajon Cedex
Tél. : 33 (0)1 69 26 76 98

Email : chocs@cea.fr

Brochure imprimée sur papier écogéré
ISSN 1961-7399
Dépôt légal à parution

*La reproduction totale ou partielle des
informations et illustrations contenues
dans ce numéro doit être soumise à
l'accord préalable du CEA. Le courrier
des lecteurs sera transmis aux auteurs
par le secrétariat de la revue.*

La revue est consultable sur

www-dam.cea.fr

sommaire

ÉDITORIAL 02

VIE SCIENTIFIQUE 04

INTERACTION RAYONNEMENT-MATIÈRE, PHYSIQUE DES PLASMAS 10

Laser Mégajoule : prise en compte de la microstructuration des faisceaux dans les simulations10

C. RUYER, A. FUSARO, A. DEBAYLE, R. CAPDESSUS, P. LOISEAU, P.-É. MASSON-LABORDE, D. MORICE

Étude du transport d'énergie dans le cuivre chauffé par laser12

L. LECHERBOURG, V. RECOULES, P. RENAUDIN, F. DORCHIES, K. TA PHUOC

PHYSIQUE NUCLÉAIRE 14

Quelle deuxième chance pour la fission nucléaire ?14

B. FRAÏSSE, G. BÉLIER

Talys : un programme informatique qui ne laisse aucun physicien nucléaire à quai !16

S. HILAIRE, A. J. KONING, S. GORIELY

Explorer le territoire nucléaire en partant des premiers principes de la physique18

J.-P. EBRAN, T. DUGUET, V. SOMÀ, M. FROSINI

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE 20

Sommerfeld dicte toujours sa loi aux électrons !20

P. ARNAULT, A. BLANCHET, J.-C. PAIN, J. RACINE, J.-P. RAUCOURT

Comprendre la Terre en laboratoire22

A. DEWAELE, B. AMADON, F. OCCELLI, V. SVITLYK, A. BOSAK

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE 24

Du palladium qui vieillit, c'est du tritium qui bulle24

B. EVIN, D. GABORIAU, S. CHALLET, A. FABRE, S. THIÉBAUT, V. PAUL-BONCOUR, E. LEROY, M. MOSKURA, T. CHARPENTIER

Que devient le gallium lorsque l'alliage plutonium-gallium s'oxyde ?26

B. RAVAT, N. FAVART, L. JOLLY, B. OUDOT, F. DELAUNAY, D. MENUT, I. POPA, S. CHEVALIER

Rentrée atmosphérique : à la recherche des meilleurs superisolants thermiques28

C. DADÔT, D. ROCHAIS, O. ROZENBAUM, D. DE SOUSA MENESES

Un nouveau matériau de protection thermique transparent aux ondes30

C. GUÉRIN, A. SAINTONGE, Y. LE PETITCORPS, A. ALLEMAND, T. PIQUERO, A. MAITRE, R. BOULESTEIX

MÉCANIQUE ET THERMIQUE 32

Formation des « coups de gouge » : le rôle de la turbulence éclairci32

F. CHEDEVERGNE, M. STUCK, M. OLAZABAL-LOUMÉ, J. COUZI

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE 34

On sait mesurer la température des plasmas34

N. NOURRY-MARTIN, A. DENEUD, C. CHOLLET, M. BONNEAU, S. BRYGOO, S. DARBON, T. VINCI, A. RAVASIO, F. BALEMBOIS

ÉLECTROMAGNÉTISME ET GÉNIE ÉLECTRIQUE 36

Sommes-nous vulnérables aux armes à énergie dirigée électromagnétique36

Y. DELVERT, A. CHAULOUX, J.-C. DIOT, T. CHANCONIE, N. RIBIÈRE-THARAUD, P. LÉVÊQUE

OPTIQUE ET OPTRONIQUE 38

Laser Mégajoule : des motifs nanométriques pour plus de puissance38

N. BONDO, P. BRIANCEAU, J. DAURIOS, S. GROSJEAN, N. ROQUIN, J.-F. GLEYZE, L. LAMAIGNÈRE, J. NEAUPOURT

SCIENCE DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT 40

Des microséismes pour comprendre les failles sismiques40

L. BOLLINGER, M. LAPORTE, L. B. ADHIKARI, B. KOIRALA

CHIMIE 42

Quel matériau pour réduire l'impact environnemental de l'industrie métallurgique ?42

O. LEMOINE, J. PERTUSET, G. BOURGÈS, L. MASSOT, M. GIBILARO, P. CHAMELOT

Une avancée décisive dans la chimie du plutonium en solution aqueuse44

J. AUPAIS, C. CHRISTIN, M. LEVIER

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL 46

L'intelligence artificielle pour la conception de nouveaux explosifs46

C. WESPISER, D. MATHIEU

Quand une quatrième dimension révèle l'inaudible48

A. LE PICHON, B. POSTE, J. VERGOZ, C. LISTOWSKI, M. CHARBIT, F. ROUEFF

Le calcul quantique peut-il accélérer les supercalculateurs ?50

B. CHICHEUREAU, P. CARRIBAUT, S. VIALLE

De l'art d'adapter le maillage pour des calculs robustes et précis52

S. DEL PINO, I. MARMAJOU

Bienvenue aux étudiants qui ont choisi le CEA - DAM

Comme à l'accoutumée, la revue *Avancées* vous propose de revenir sur quelques-unes des publications les plus marquantes effectuées par les équipes de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA en 2023. Si cette courte sélection ne peut pas être représentative des milliers de communications qu'elle a produites et des centaines d'articles qui ont été acceptés dans des revues à comité de lecture, elle donne malgré tout une idée de la diversité des thématiques abordées, des mathématiques à la chimie, de l'informatique à la métrologie, de la physique nucléaire à l'astrophysique. Cette production scientifique variée et de qualité est le fruit de l'excellence du travail des équipes de la DAM, équipes que je salue aussi pour leur capacité à accueillir en leur sein des étudiants de tous horizons. Ce mérite qui est le leur n'est peut-être pas suffisamment connu, c'est pourquoi j'ai décidé d'y consacrer cet éditorial.

En 2023, la DAM a ainsi accueilli un nombre record d'étudiants. Au total, dans ses cinq centres, ce sont 260 alternants, 230 stagiaires et 170 thésards qui sont venus compléter ou achever leur formation au sein des équipes de la DAM. Et pour être complet, je me dois de mentionner aussi les 40 postdoctorants qui ont activement contribué aux études qu'elle mène.

Ce succès n'est pas le fruit du hasard mais le résultat d'un travail efficace, fourni notamment par la direction des ressources humaines de la DAM et par les équipes chargées de l'animation de la vie scientifique et technique dans les centres. Je tiens à saluer ici plus particulièrement l'action des assistants scientifiques, rattachés au directeur de chacun de ces centres (voir photographie).

Qu'on ne s'y trompe pas, il n'y a de ma part aucun triomphalisme dans le rappel de ces chiffres. Au contraire, je voudrais prendre le temps d'expliquer que, selon moi, ce succès nous oblige : si ces centaines d'étudiants sont aujourd'hui des témoins privilégiés du travail des équipes de la DAM, ils seront demain, forts de ce qu'ils y auront vécu, ses ambassadeurs tout au long de leur parcours professionnel.

Je sais, malgré leur nombre et la diversité des situations, qu'ils auront eu pour encadrants des techniciens, des ingénieurs ou des chercheurs pour qui le mot « intégrité » n'est pas un vain mot. On ne s'investit pas au service de la dissuasion nucléaire française, on ne contribue pas à ce que le chef de l'État considère comme « *l'assurance-vie de la Nation* » sans un sens aigu du devoir. Et l'intégrité scientifique, valeur cardinale de la science ouverte qui gagne peu à peu le monde de la recherche, va de soi à la DAM.

Je sais qu'ils auront pris part à des projets ambitieux parce que les activités scientifiques et techniques de la DAM, régulièrement évaluées, sont réputées pour être au meilleur niveau. Pour ne prendre qu'un seul exemple – celui de la maîtrise des écoulements hypersoniques –, la DAM a conclu en 2023 une collaboration avec l'Onera, organisme de référence dans ce domaine, et assuré la présidence de l'association nationale HyFAR-ARA sur le phénomène de transition laminaire-turbulent.

Je sais qu'ils auront compris que l'innovation à la DAM est une obligation. Personne ne peut croire que les futures têtes nucléaires ou les chaufferies nucléaires du futur porte-avions et des futurs sous-marins de la Marine nationale pourront se satisfaire des solutions déjà mises en



←
Le directeur scientifique et les assistants scientifiques des directeurs de centre CEA - DAM.

œuvre ou même de méthodologies existantes. Nos codes de calcul, nos modèles physiques ou numériques, nos approches, nos dispositifs de mesure, nos logiciels d'exploitation, etc., tous ces sujets appellent des solutions nouvelles... à imaginer pour la plupart.

Je sais qu'ils auront eu plaisir à travailler en équipe. Les salariés de la DAM connaissent la force du collectif. Ils savent qu'on ne s'attaque pas seul à une question ouverte de physique fondamentale, qu'on n'exploite pas seul des installations expérimentales souvent uniques, comme le Laser Mégajoule (LMJ) ou le moyen de radiographie Epure, ou encore qu'on ne garantit pas seul la qualité de la production de sous-ensembles de têtes nucléaires.

Je sais enfin qu'ils auront une bonne idée de ce que la DAM peut offrir en matière d'accomplissement. Forte de missions claires et qui s'inscrivent pour les principales dans la durée, de moyens à la hauteur des défis à relever et de collaborations au meilleur niveau mondial, la DAM est l'endroit idéal pour approfondir son expertise ou au contraire varier les plaisirs et découvrir une grande variété de métiers.

Intégrité, ambition, innovation, esprit d'équipe et accomplissement. Telles sont les cinq valeurs que les salariés de la DAM ont eux-mêmes choisies pour qualifier leur travail au service de la défense et de la sécurité de notre pays. C'est pourquoi je suis confiant; je sais que, malgré leur nombre et la diversité des situations, les étudiants qui ont choisi de nous rejoindre le regrettent rarement. J'espère qu'ils seront fiers, comme les salariés de la DAM le sont, d'avoir œuvré à des missions d'exception, conduites au bénéfice de tous.

Olivier VACUS

Directeur scientifique du CEA - DAM

vie scientifique

Prix et distinctions reçus en 2023

Élection à la vice-présidence de la commission H d'Ursi-France

Jean-François RIPOLL, du centre DAM Île-de-France, a été élu vice-président de la commission H, ondes dans les plasmas, de l'union radio-scientifique internationale française (Ursi-France) qui compte dix commissions. Ursi-France a été créée en 1928 pour stimuler, coordonner, promouvoir, organiser et uniformiser les études des domaines des sciences de la radioélectricité, des télécommunications et de l'électronique, et de la photonique.

Best paper award de la conférence EuroMPI'23

L'article « MPI application binary interface standardization », coécrit par **Marc PÉRACHE** du centre DAM Île-de-France, a reçu le titre de *best paper award* de la conférence EuroMPI'23.

Meilleur oral à la conférence internationale Science and Technology

À l'occasion de la conférence internationale Science and Technology, organisée par l'Organisation du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Otice) à Vienne du 19 au 23 juin, le prix du meilleur oral a été décerné à **Julien VERGOZ** du centre DAM Île-de-France. Sa présentation portait sur le travail international collaboratif mené par le CEA - DAM pour analyser les données relatives à l'éruption aux conséquences planétaires du volcan Hunga Tonga, en janvier 2022, dont les données issues du système de surveillance international de l'Otice.

Prix de la meilleure thèse à la conférence SPIE Laser Damage Symposium

Lors de la conférence SPIE Laser-Induced Damage in Optical Materials qui a eu lieu du 17 au 20 septembre à Livermore, aux États-Unis, **Sylvain GROSJEAN**, doctorant au Cesta, a été récompensé par le prix M.-J.-Soileau *best student paper award* de la meilleure présentation d'étudiant. Conduits dans le

cadre du LRC LoLaH (université Aix-Marseille), ses travaux concernent l'endommagement laser à 351 nm des optiques en silice du Laser Mégajoule pour des polarisations des faisceaux laser linéaire et circulaire.

Prix de thèse du ministère des Armées

Élodie KAESHAMMER a reçu le prix de thèse du ministère des Armées, via l'Agence innovation défense, pour son étude expérimentale et numérique de la sensibilité de compositions énergétiques. Cette thèse a été menée au centre de Gramat en collaboration avec le Centre de morphologie mathématique de Mines ParisTech.

Accessit pour le prix de thèse du GDR IG-RG

François PROTAIS, étudiant au centre DAM Île-de-France, a reçu un accessit pour le prix de thèse du GDR Informatique géométrique et graphique, réalité virtuelle et visualisation (IG-RG) pour sa thèse intitulée *Maillage à dominante polycube* effectuée sous la direction de Dmitry SOKOLOV (université de Lorraine) et Franck LEDOUX (CEA - DAM).

Colloques organisés en 2023

49th Conference on Plasma Physics

Cette conférence, organisée par le Cesta avec le soutien de la Région Nouvelle-Aquitaine et de l'université de Bordeaux, s'est déroulée du 3 au 7 juillet à Bordeaux. Elle a rassemblé 850 participants de 31 nationalités. Les avancées les plus récentes dans le domaine de la fusion par confinement inertiel ou magnétique et de l'astrophysique ont été présentées.

EuroMPI'23

EuroMPI est une conférence annuelle majeure sur les travaux de recherche autour du modèle de programmation parallèle MPI (applications et évolutions du langage). L'organisation de l'édition 2023 a été confiée au CEA - DAM. La conférence s'est déroulée à Bristol, au Royaume-Uni, du 11 au 13 septembre, en coordination avec le workshop international

sur OpenMP (IWOMP). Elle a rassemblé une cinquantaine de participants venus d'Europe, des États-Unis, du Japon et d'Australie.

Symposium Transition

Ce symposium organisé par l'association HyFAR-ARA (www.hyfar-ara.org) s'est déroulé à Bordeaux du 4 au 6 octobre. Il a rassemblé 50 scientifiques issus d'organisations académiques (universités d'Oxford, de Purdue, de Stuttgart), étatiques (CEA, CNRS, DLR, Onera, VKI) et industrielles (Ariane Group, MBDA) pour partager leurs connaissances sur la transition laminaire-turbulente en régime hypersonique, sujet primordial pour la conception des véhicules hypersoniques.

Europyro 2023

Le congrès international Europyro 2023 s'est tenu du 11 au 14 septembre 2023 à Saint-Malo. Le nombre de participants était en hausse par rapport à l'édition précédente de 2019. Le programme scientifique comprenait 115 conférences orales, 30 posters et une dizaine de stands d'exposants. Le CEA - DAM a assuré les fonctions de chairman en présidant ou coprésidant 8 des 20 sessions du congrès et a pris part au comité scientifique et au comité d'organisation. Enfin,

18 communications des centres du Ripault, de Gramat, de la DAM Île-de-France et du Cesta ont été présentées durant le congrès.

MeshTrends'2023

MeshTrends est un workshop de la 17^e édition du U. S. National Congress of Computational Mechanics (USNCCM), qui s'est déroulé du 23 au 27 juillet à Albuquerque, aux États-Unis. Organisé par F. LEDOUX (CEA - DAM), S. OWEN et M. STATEN (Sandia National Laboratories), ce workshop a porté sur le sujet du maillage pour la simulation numérique.

LAD'2023

Le LAD (Lustre Administrator and Developer workshop) est une conférence organisée annuellement par le CEA - DAM depuis 2012. Elle regroupe les acteurs de la communauté open source gravitant autour du logiciel Lustre, qui permet de faire fonctionner les grands systèmes de stockage de données des centres de calcul. Ces acteurs peuvent ainsi partager retours d'expérience, nouvelles fonctionnalités, outils et bonnes pratiques d'utilisation. La dernière édition a eu lieu les 5 et 6 octobre à Bordeaux et a connu un grand succès avec la participation de 80 personnes en provenance de 17 pays, dont le Japon, l'Australie, les États-

Unis et de nombreux pays européens, ainsi que près de 40 organisations.

2^e Rencontre PhyNuBE (Physique Nucléaire de Basse Énergie)

Organisée par le comité scientifique du GDR Réactions, Structure et Astrophysique Nucléaire : Expériences et Théories (RéSANET) dont le CEA – DAM fait partie, la rencontre Physique Nucléaire de Basse Énergie (PhyNuBE) s'est déroulée du 26 au 31 mars au centre Paul-Langevin d'Aussois. Regroupant 67 participants français et étrangers, cette rencontre visait à étudier le thème de l'agrégation des nucléons dans le noyau et celui des symétries en physique nucléaire.

Journées Accélérateurs de la Société française de physique

Les journées Accélérateurs de la Société française de physique ont rassemblé la communauté Accélérateurs française (laboratoires, industriels, étudiants) à Roscoff du 4 au 6 octobre pour présenter l'état de l'art des accélérateurs. Le CEA – DAM exploite plusieurs accélérateurs pour répondre à ses besoins : Elsa, 4MV, Nénuphar au centre DAM Île-de-France, Epure à Valduc. Vincent LE FLANCHEC, du centre DAM Île-de-France, a présidé le comité d'organisation.

Journées de caractérisation micro-ondes et matériaux

La XVII^e édition des journées de caractérisation micro-ondes et matériaux s'est tenue du 3 au 5 avril à Tours et a rassemblé environ 80 personnes de la communauté française des hyperfréquences et des matériaux. Cette édition était conjointement organisée par le laboratoire Greman (groupe de recherche en matériaux, microélectronique, acoustique, nanotechnologies) de l'université de Tours et le centre CEA – DAM du Ripault. Cette

manifestation a permis des échanges fructueux sur les problématiques respectives des deux communautés.

Juadam : 4^{es} Journées des utilisateurs Abaqus DAM

Le centre CEA – DAM du Ripault a organisé ces journées les 29 et 30 novembre à Tours, sous l'égide de la communauté de savoirs Mecadam (Mécanique des matériaux et des structures à la DAM). Abaqus est un code de calcul utilisé par la DAM pour des simulations numériques en mécanique des solides et des structures, en thermique et en thermomécanique. L'objectif de cette manifestation, qui a rassemblé 70 personnes issues de l'ensemble des centres du CEA – DAM, était de partager les pratiques entre les utilisateurs et les connaissances techniques dans la mise en œuvre et la maîtrise de ce logiciel.

Journées centre-ouest de la Société chimique de France

Ces Journées, pour lesquelles le centre CEA – DAM du Ripault est membre du comité scientifique, ont eu lieu les 15 et 16 juin à Orléans. Elles ont rassemblé une centaine de chimistes de différents horizons (doctorants, postdoctorants, enseignants-chercheurs, chercheurs, personnels techniques) originaires de Limoges, Orléans, Poitiers, La Rochelle et Tours. Ces journées s'articulent autour de six conférenciers invités dont les présentations ont porté sur les thématiques de chimie et énergie, chimie des produits naturels-molécules biosourcées, chimie analytique, imagerie et chimie physique des matériaux.

École thématique de simulation numérique

La onzième édition de cette école s'est tenue du 4 au 8 septembre à Beaulieu-sur-Dordogne. Elle avait pour thème la modélisation des matériaux

soumis à des sollicitations dynamiques extrêmes. La quarantaine de participants, issus des centres DAM Île-de-France, de Gramat et du Cesta, a suivi les cours et les travaux dirigés dispensés par des orateurs du CEA et d'Impetus. La proximité du centre de Gramat a été mise à profit pour une visite de ses installations expérimentales.

Séminaire HDR de la DAM

Ce séminaire s'est déroulé du 13 au 17 novembre 2023 en résidence à l'hôtel du château de la Tour à Cadillac-sur-Gironde. Organisé sous l'égide du directeur scientifique depuis 2019, il a rassemblé huit ingénieurs-chercheurs de la DAM (Cesta, DAM Île-de-France et Gramat) et un ingénieur de recherche du LCTS. L'organisation et l'encadrement ont été assurés par D. BOUCHE, P.-H. MAIRE et G. MAZÉ-MERCEUR qui ont soutenu et guidé les participants de ce séminaire dans la préparation de leur HDR.

Livre paru en 2023

Les 150 ans de la Société française de physique, Panorama historique et scientifique Chapitre 10 : « Division Accélérateurs »

V. Le Flanchec (CEA – DAM), S. Joly (CEA – DAM), J.-M. Ortega, L. Rinolfi, M. Labat
EDP Sciences, Paris, 30 juin 2023,
ISBN : 978-2-7598-3075-6.

Faits marquants de l'année

NumPEX : lancement d'un plan d'investissement pour l'exascale

Co-piloté par le CEA, le CNRS et l'Inria, le Programme et équipement prioritaire de recherche (PEPR) NumPEX (Numérique pour l'exascale), financé par le plan d'investissement France 2030, a été officiellement lancé le 24 février 2023 au Très Grand Centre de calcul du CEA par Sylvie Retailleau, ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, et Jean-Noël Barrot, ministre délégué chargé de la Transition numérique et des Télécommunications. Des chercheurs du CEA – DAM et du CEA – DRF et leurs partenaires ont assisté à plusieurs présentations sur l'enjeu des technologies exascale et sur les « briques » technologiques logicielles que ce programme d'investissement

visait à concevoir et développer pour équiper les futures machines exascale. Les ministres ont également pu voir les supercalculateurs Joliot-Curie et Topaze, accompagnés par l'administrateur général du CEA, le directeur des applications militaires et le directeur du centre DAM Île-de-France.

Première caractérisation des signatures infrasonores des cyclones méditerranéens

Pour la première fois, des chercheurs ont pu analyser les détections infrasonores de cyclones méditerranéens dans toute la bande d'intérêt (0,02-4 Hz). Ces résultats apportent aux scientifiques du centre DAM Île-de-France un outil supplémentaire pour la surveillance des événements extrêmes en Méditerranée. Discriminer les sources naturelles des sources artificielles est essentiel. Un modèle d'émission acoustique de la houle permet désormais d'identifier les sources basse fréquence comme étant liées aux vagues causées par le cyclone. Ces résultats ont été obtenus par une approche originale multitechnologie reliant les

détections infrasonores aux détections d'éclairs par un réseau au sol, ainsi qu'aux observations satellitaires de convection nuageuse.

Fer cristallin en phase epsilon : voyage au centre de la Terre

Des chercheurs du centre DAM Île-de-France ont réussi à synthétiser du fer cristallin en phase dite « epsilon » (voir article p. 22-23).

Lancement de la chaire d'enseignement et de recherche « Physique des hautes densités d'énergie et fusion inertielle »

Ce partenariat a été officiellement lancé le 4 décembre par le directeur des applications militaires du CEA et la directrice générale de l'École polytechnique. Cette chaire proposera notamment aux étudiants de 3^e année du cursus ingénieur un nouvel enseignement d'introduction à la physique des hautes densités d'énergie. Cette chaire permettra *in fine* de renforcer la communauté académique dans ce domaine stratégique pour la Direction des applications militaires (DAM) du CEA.

Nouveaux accords de partenariat en 2023

Partenariat pédagogique avec l'ENSIE

Déjà impliqué dans la filière d'enseignement en matière de calcul haute performance (HPC) et de données massives développée avec l'École nationale supérieure d'informatique pour l'industrie et l'entreprise (ENSIE), le centre DAM Île-de-France a formalisé le 31 mars un accord de partenariat visant à renforcer notre collaboration dans le domaine de l'informatique quantique, la cybersécurité et les interactions numériques. Plus de 10 ingénieurs-chercheurs de la DAM contribuent à l'enseignement, ce partenariat permettant une implication adaptée à nos besoins dans l'élaboration des programmes et également d'alimenter régulièrement nos viviers de recrutement en talents issus de l'école.

ANR g4QED (*Gamma photon sources as a path for strong-field QED experiments*)

Les progrès en matière de lasers et d'accélérateurs de particules ouvrent la voie à l'exploration de processus d'électrodynamique quantique « en champ fort ». Outre leur intérêt fondamental en astrophysique, ces processus peuvent être exploités pour concevoir de nouvelles sources de rayonnement gamma d'une intensité inédite. Tel est l'objectif du projet ANR g4QED, qui réunit des physiciens du Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (Luli), du Laboratoire d'optique appliquée (LOA) et du CEA – DAM. Les expériences menées dans ce cadre sur le laser Apollon et l'accélérateur Facet-II du SLAC (Stanford) viseront à optimiser les processus radiatifs via divers schémas d'interaction et à valider les outils de simulation avancés développés au sein de la collaboration.

Lancement du LRC XCEM

Le laboratoire de recherche conventionné (LRC) XCEM rassemble désormais les activités en électromagnétisme des centres de Gramat, du Cesta et du Ripault avec le laboratoire XLIM de l'université de Limoges. Les thèmes de ce LRC concernent les couplages électromagnétiques sur des structures, câblages et dispositifs électroniques, les antennes, la modélisation des couplages à travers des codes de simulation numérique, la mise en œuvre de matériaux (notamment des céramiques) pour des composants hyperfréquences.

Collaboration sur l'interaction choc-particules en géométrie convergente

Le centre DAM Île-de-France s'intéresse à la modélisation et à la prévision des écoulements diphasiques. Dans le cadre de précédentes collaborations avec le CEA, l'Institut universitaire des systèmes thermiques industriels (Iusti, université Aix-Marseille) a développé des tubes à choc

convergeants, cylindriques et sphériques. Le CEA et l'Iusti souhaitent maintenant mettre en commun leurs expertises pour étudier expérimentalement la dynamique de particules sous l'effet d'une ou plusieurs ondes de choc. Mises au point en géométrie plane, ces expériences se poursuivront en géométrie convergente. En faisant varier les paramètres décrivant les particules et l'écoulement gazeux, une base de données sera construite pour contraindre les modèles et simulations.

Projet ANR Moreva

En collaboration avec les laboratoires IMS de l'université de Bordeaux et IES de celle de Montpellier, le centre de Gramat a été retenu par l'ANR pour le projet Astrid Mavera (Méthodologie d'Analyse de la Vulnérabilité Électromagnétique de Robots Autonomes). Le travail s'appuiera sur la mise en œuvre d'un robot générique conçu spécifiquement pour observer et analyser sa susceptibilité électromagnétique, qu'il s'agisse d'un environnement civil (attaque électromagnétique sur les hôpitaux, les réseaux d'énergie, les réseaux de communication, la mobilité électrique...) ou bien militaire pour la protection de notre capacité robotique ou la neutralisation de celle du côté adverse.

Projet FemTraXS

Les lasers à impulsion ultrabrève permettent de créer et d'étudier la matière dans un régime appelé dense et tiède. Ils permettent également de créer des sources ultra-intenses de rayonnement X d'une durée inférieure à la picoseconde, offrant ainsi la possibilité de réaliser des expériences inédites de type pompe-sonde. Financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR) et réunissant le centre DAM Île-de-France, le Laboratoire d'optique appliquée (LOA) et l'unité mixte de recherche Celia, le projet FemTraXS, pour *Femtosecond phase TRANSitions with X-ray absorption Spectroscopy*, vise à utiliser ce principe pour étudier la dynamique des changements d'état de différents matériaux dans le régime dense et tiède grâce à la spectroscopie d'absorption du rayonnement X.

Sélection par l'ANR du projet Pacte-Espace

Piloté par le centre DAM Île-de-France, en collaboration avec le Laboratoire de physique des plasmas (LPP), l'Institut de recherche en astrophysique et planétologie (Irap) et Airbus Defense and Space (Airbus-DS), le projet Pacte-Espace a été sélectionné par l'Agence nationale de la recherche (ANR) dans le cadre d'un Accompagnement spécifique des travaux de recherches et d'innovation défense (Astrid). Visant à étudier la dynamique d'électrons énergétiques et d'ondes dans l'espace proche de la Terre lors d'événements naturels et d'activités humaines, ce projet permettra de suivre et de progresser dans le domaine des activités électroniques dans l'espace en utilisant la synergie entre les observations physiques par satellite, la théorie et la simulation numérique.

Projet Liquid-Liquid transition, polymorphism and second critical point in dense liquids (LiLi)

Dans le cadre du prolongement du projet Structure et dynamique des fluides moléculaires simples sous conditions extrêmes de pression et de température (Moflex) financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR), le projet LiLi bénéficie

également d'un financement de l'ANR. Ce projet ayant pour partenaires le centre DAM Île-de-France, l'European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) et l'Institut de minéralogie, de physique des matériaux et de cosmochimie (IMPMC) a pour objectif d'étudier le polymorphisme dans les fluides moléculaires denses. Un but important est de mettre en évidence des transitions de phase fluide-fluide sous conditions extrêmes de pression et de température. Il s'appuie sur la spectroscopie Raman, la spectroscopie Brillouin et la diffraction de rayonnement X par un échantillon de matière comprimé dans une cellule à enclumes de diamant et chauffé par un faisceau laser.

Projet Photonastic : modélisation des matériaux photonastiques

Les matériaux photonastiques, en subissant des déformations prédéterminées et répétées sous irradiation, convertissent l'énergie lumineuse en énergie mécanique. Financé par l'Agence nationale de la recherche (ANR) et qui réunit le centre DAM Île-de-France et l'Institut Chemistry for Life and Health Sciences (i-CLeHS) de Chimie ParisSaclay, le projet Photonastic vise à identifier les paramètres, de l'échelle moléculaire à supramoléculaire, impliqués dans la réponse mécanique de tels matériaux (ici un film constitué de molécules photochromes dispersées dans une matrice polymère). Il s'agit d'étudier les mécanismes multi-échelles impliqués : la photoréaction ultrarapide au niveau moléculaire, puis le transfert de quantité de mouvement vers la matrice environnante et, enfin, la relaxation à long terme du polymère à l'origine de la déformation macroscopique.

Lancement du LRC Fragdyn

Les centres CEA – DAM de Gramat et DAM Île-de-France se sont associés dans le cadre du LRC Fragdyn avec l'ISAE Supaéro (Toulouse), l'université de Lorraine (Metz) et l'École des mines de Saint-Étienne. Il s'agit de renforcer une expertise commune en matière d'expérimentation, de modélisation et de simulation de la fragmentation dynamique des structures métalliques.

Projet ANR Escapade

En collaboration avec les laboratoires Siame de l'université de Pau et des pays de l'Adour, Metsy de l'université Paris-Saclay et XLIM de l'université de Limoges, les sociétés Itopp et Cisteme, le centre de Gramat a été retenu par l'ANR pour le projet Astrid Maturation Escapade. Il s'agit d'un projet dual visant à monter en maturité sur le développement de deux sources capables de produire des ondes électromagnétiques impulsionnelles dites ultralarge bande et bande ultraétroite. Les applications sont duales. Dans le domaine médical pour le civil, l'électro-perméabilisation sans contact des cellules est considérée pour des traitements anticancéreux. Pour la défense, il s'agit d'évaluer les effets d'une telle agression électromagnétique sur diverses cibles électroniques.

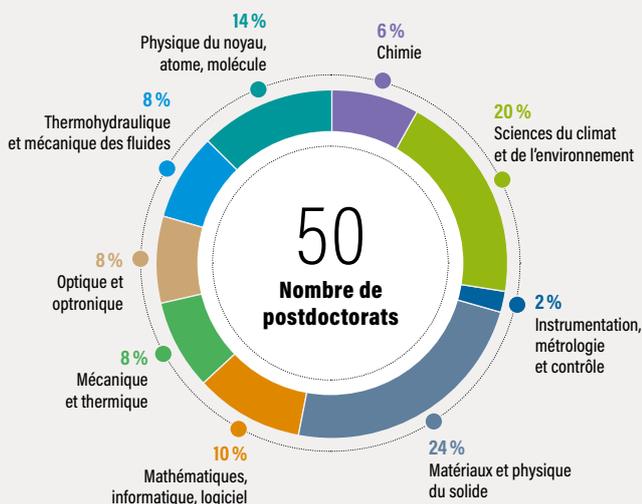
Imap Paris (Institut des matériaux poreux)

Dans le cadre d'une thèse, une collaboration Valduc-Imap a été créée sur la possibilité d'utiliser des MOF (*Metal Organic Frameworks*) pour la séparation des isotopes de l'hydrogène. L'Imap est le spécialiste français des MOF. L'étude portera en particulier sur la résistance de ces matériaux sous tritium (radiolyse).

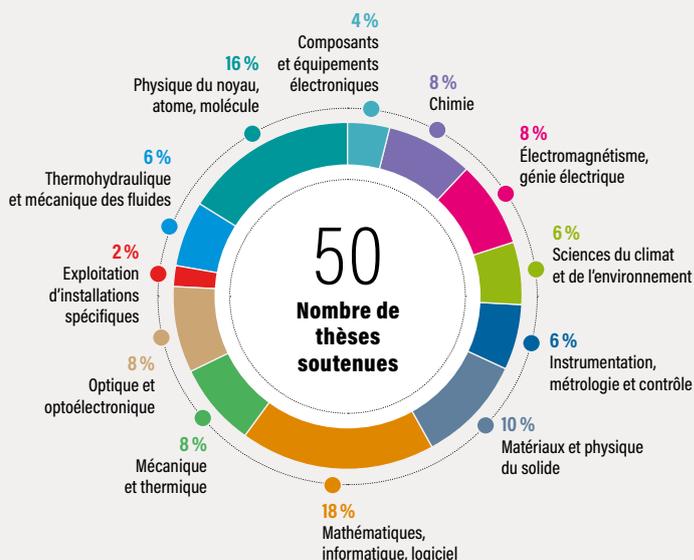
Thèses soutenues et en préparation - Postdoctorats

En 2023, 189 doctorants préparaient une thèse au CEA - DAM, soit dans un laboratoire d'un des cinq centres, soit dans un laboratoire partenaire avec le soutien financier du CEA - DAM ; 50 l'ont soutenue au cours de l'année. Par ailleurs, 50 docteurs étaient en contrat postdoctoral (voir aux pages suivantes les listes des thèses soutenues et des postdoctorats).

Répartition des postdoctorats par domaine scientifique et technique



Répartition des thèses soutenues par domaine scientifique et technique



Publications scientifiques et techniques

En 2023, le CEA - DAM a publié 401 articles et comptes rendus de conférence dans des journaux à comité de lecture, ainsi que 32 comptes rendus de conférence dans un livre ou dans une série (ISI-Web of Science, 31/05/2024).

Habilitations à diriger les recherches (HDR)

6

Habilitations à diriger les recherches soutenues en 2023.

David HÉBERT

Centre du Cesta
Université Paul-Sabatier Toulouse III
Spécialité : dynamique rapide

Stéphane DEL PINO

Centre DAM Île-de-France
Sorbonne Université
Spécialité : mathématiques appliquées, simulation numérique

Franck PHILIPPE

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : physique des plasmas

Thomas FARGES

Centre DAM Île-de-France
Université d'Orléans
Spécialité : électromagnétisme

Patrick ARMAND

Centre DAM Île-de-France
École centrale de Lyon
Spécialité : sciences atmosphériques

Stéphane HILAIRE

Centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay
Spécialité : physique nucléaire

Thèses de doctorat soutenues en 2023

CHIMIE

Pierre ASPLANATO, *Étude des mécanismes de formation par procédé hydrothermal et d'altération dans différents milieux de particules de référence d'oxydes d'actinides*, université de Montpellier.

Romain CLAVEAU, *Modélisation de la décomposition des matériaux énergétiques et de leurs sensibilités*, université de Tours.

Benjamin KLOPP, *Chimie des 3a,6a-diazapentalènes : synthèse, réactivité et application à la conception de molécules énergétiques*, université d'Orléans.

Julien PERTHUISSET, *Étude de matériau d'anode inerte : application à la conversion d'oxyde métallique en métal par électrolyse en milieu chlorures fondus*, université Paul-Sabatier Toulouse III.

COMPOSANTS ET ÉQUIPEMENTS ÉLECTRONIQUES

Gallien DELATTRE, *Systèmes de récupération d'énergie vibratoire large bande à conversion électromagnétique*, université Grenoble-Alpes.

Jeoffray VIDALOT, *Dosimétrie par fibre optique d'installations d'irradiation expérimentales*, université de Saint-Étienne.

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

Amandine BOUCART, *Diffraction par une couche mince de particules : modèle asymptotique et simulations numériques*, POEMS-UMA-ENSTA.

Yannick DELVERT, *Contribution à l'étude de sources micro-ondes de forte puissance à efficacité optimisée et à fréquence variable*, université de Limoges.

Matthieu ELINEAU, *Techniques de contrôle de la réflexion d'une onde plane électromagnétique à l'aide de métasurfaces*, IETR-INSA Rennes.

Léo SOUSBIELLE, *Évaluation d'une nouvelle architecture pour des générateurs impulsions de classe mégavolt minimisant la pollution liée aux techniques d'isolation*, université de Pau et des pays de l'Adour.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Loïs DUFOUR, *Quantification de la distribution des vitesses d'écoulement dans l'aquifère fracturé de la craie de Champagne par multitraçages élémentaires et isotopiques*, ENS.

Marine MENAGER, *Étude de l'utilisation de la méthode GRID MT pour la détection et la caractérisation d'événements sismiques : de l'échelle régionale à l'échelle locale*, université de Nice-Côte d'Azur.

Michaël SUSSET, *Étude, caractérisation et mise en œuvre du couplage ablation laser-spectrométrie de masse à source plasma pour le dosage des impuretés élémentaires à l'état de traces dans des matériaux pulvérulents*, université de Pau et des pays de l'Adour.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

Adrien DUDES, *Focalisation d'un faisceau intense d'électrons relativistes pour la radiographie éclair*, université de Bordeaux.

Arthur HIRSCH, *Étude numérique et expérimentale d'un nouvel accélérateur de protons par voie laser*, université de Bordeaux.

Isia MOUSSEAU, *Émission électronique d'une cathode froide de velours en régime multi-impulsions*, université de Pau et des pays de l'Adour.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Thomas BOURDEAU, *Élaboration de matériaux ultra-réfractaires pour composites UHT-CMC (Ultra High Temperature Composite à Matrice Céramique)*, université de Bordeaux.

Robin FRÉVILLE, *Transitions de phase et microstructures induites dans les métaux en conditions extrêmes : fer et étain*, université Paris-Saclay.

Amira GUEDICHE, *Élaboration et caractérisation de matériaux optiques pour atténuer la densité de dommages laser induits par les lasers de puissance*, université de Tours.

L. MOUTIN*, *Effet de l'irradiation sur la porosité filamentaire et impact sur la conductivité thermique d'un combustible UO_2* , université Aix-Marseille.

Franck POLEWCZYK, *Modélisation des carbones denses par une approche guide-image polygranulaire et caractérisation de la relation structure-élasticité*, université de Bordeaux.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Sofiane BENZAIT, *Génération et adaptation de maillages mixtes à l'aide de métriques orientées*, université Paris-Saclay.

Philippe DENIEL, *NFS-Ganesh : évolutions d'un serveur NFS pour le HPC du terascale à l'exascale*, université Paris-Saclay.

Adrien FRIGERIO, *Définition et réalisation d'un logiciel d'autoradiographie d'objets émetteurs de rayonnements gamma*, université de Bourgogne.

Hubert HIRTZ, *Partitionnement de maillages pour l'équilibrage de charge de simulations multiphysiques*, université Paris-Saclay.

Bastien MANACH-PÉRENNOU, *Méthodes numériques lagrangiennes pour l'hydrodynamique radiative multimatériau*, université Versailles-Saint-Quentin et université Paris-Saclay.

Florent NAULEAU, *Méthode des frontières immergées pour la simulation aux grandes échelles de véhicules de rentrée hypersonique*, université de Bordeaux.

Julie PATELA, *Arbitrary-order finite volume schemes preserving positivity for diffusion problems on deformed meshes*, université Paris-Cité.

Romain PEREIRA, *Exploitation efficace de l'asynchronisme de tâche dans les applications parallèles HPC*, ENS Lyon.

Alexiane PLESSIER, *Implicit semi-lagrangian schemes for compressible gas dynamics*, Sorbonne Université.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Manon BOUR, *Caractérisation et modélisation du comportement mécanique d'élastomères compressibles*, université de Tours.

Luc BREMAUD, *Contribution à l'étude de l'endommagement dynamique de céramiques : simulation directe du choc laser*, Paristech.

Cyril DAOÛT, *Modélisation des propriétés radiatives spectrales de microstructures poreuses réfractaires*, université d'Orléans.

Alexandre PORTAL, *Modélisation multiéchelle du comportement thermomécanique d'un composite 3D carbone-carbone*, université de Bordeaux.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Thomas DUBÉ, *Assemblage d'hétérostructures optiques amplificatrices pour les pilotes de laser de puissance*, Normandie Université.

Guillaume HALLO, *Optimisation des capacités de détection et de suivi de la croissance de l'endommagement laser pour l'installation LMJ*, université Paris-Saclay.

Chloé LACOMBE, *Suivi et analyse de l'endommagement laser des hublots de chambre du LMJ*, Aix-Marseille université.

Maxime NOURY-MARTIN, *Concentrateurs luminescents pour l'étalonnage de diagnostics de pyrométrie optique : application aux plasmas créés par laser*, université Paul-Sabatier Toulouse III.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

François CLAEYS, *Mesure, modélisation et évaluation des sections efficaces à seuil $(n, n\gamma)$ d'intérêt pour les applications de l'énergie nucléaire*, université de Strasbourg.

Jérémy FAURE, *Modeling of electromagnetic instabilities in extreme particle and photons beam-plasma interaction*, Sorbonne Université.

Alexis FRANCHETEAU, *Étude de la désexcitation radiative des fragments de fission dans la fission spontanée de ^{252}Cf* , université Paris-Saclay.

Albertine OUDIN, *Étude cinétique de la dynamique du couplage d'onde en présence de faisceaux laser lissés spatialement*, université Paris Saclay.

Edoardo ROVERE, *Génération et interaction des électrons suprathermiques en fusion par confinement inertiel*, université de Bordeaux.

Alexandre STATHOPULOS, *Dimensionnement des sources térahertz produites par des plasmas d'air*, université Paris-Saclay.

Colomban TAILLIEZ, *Sources térahertz intenses produites par des interactions laser-plasmas relativistes en présence de champ magnétique*, université Paris-Saclay.

Geoffrey ZIETEK, *Rôle de la force tenseur dans les approches effectives ; application aux noyaux impairs-impairs $N=Z$* , université Paris-Saclay.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

Arthur IZIQUEL*, *Modélisation multiéchelle du phénomène de condensation en paroi en présence de gaz incondensables. Application à l'enceinte de confinement*, université Paris-Saclay.

Maxime STUCK, *Ablation d'un matériau de protection thermique en régime de transition laminaire-turbulent*, INP Toulouse.

Lucas TALLOIS, *Simulation numérique de l'ablation liquide*, INSA Toulouse.

EXPLOITATION D'INSTALLATIONS SPÉCIFIQUES

Clara-Marie ALVINERIE, *Étude numérique et expérimentale de la dynamique des faisceaux d'électrons dans les accélérateurs linéaires à induction*, université de Caen Normandie.

* Thèse préparée à la Direction des énergies du CEA.

Postdoctorats en cours en 2023

CHIMIE

Martin LEVIER, *Couplage EC-ICPMS pour la datation directe par mesure quasi simultanée du père et du descendant : applications aux couples Pa-U et Pu-U et pour la mesure isotopique d'échantillons de MOX*, DAM Île-de-France.

Tanguy PICARD, *Formulation de matériaux énergétiques par RAM*, Le Ripault.

Maxime PUYOT, *Élaboration de co-cristaux de matériaux énergétiques*, Le Ripault.

SCIENCES DU CLIMAT ET DE L'ENVIRONNEMENT

Léo ADENIS, *Simulation eulérienne du transport atmosphérique de radionucléides*, DAM Île-de-France.

Jérôme AUBRY, *Réponse d'instabilités gravitaires à des sollicitations statiques et dynamiques. Application à la zone Nord de l'atoll de Mururoa*, DAM Île-de-France.

Charlotte BRUN, *Spéciation moléculaire de radionucléides en milieu marin*, DAM Île-de-France.

Benoit DERODE, *Machine (deep) learning appliqué à la détection et à la caractérisation d'événements sismiques*, DAM Île-de-France.

Grégoire HELLER, *Inversion généralisée des propriétés énergétiques du signal sismique régional*, DAM Île-de-France.

Benjamin JEANNOT, *Modélisation hydrogéologique d'un aquifère calcaire fissuré : double porosité et transport*, DAM Île-de-France.

Samuel KRISTOFFERSEN, *Amélioration des stratégies de déploiement par calibration sur site traçable des capteurs infrason*, DAM Île-de-France.

Roman LECONTE, *Développement de métamodèles pour le calcul rapide des effets mécaniques des ondes de souffle*, DAM Île-de-France.

Aurélien LOUIS-NAPOLÉON, *Simulation d'effondrements de terrain et des vagues associées par le code 3D OpenFoam*, DAM Île-de-France.

Chantal VAN DINTHER, *Fiabilité des décisions pour la surveillance opérationnelle de l'environnement*, DAM Île-de-France.

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

Maxime BALESTRAT, *Élaboration et caractérisation de matrices oxynitrures pour composites à matrice céramique*, Le Ripault.

Étienne BARRAUD, *Étude expérimentale de la transition bêta-gamma de l'étain induite*, DAM Île-de-France.

Rami BECHARA, *Modélisation de l'infiltration chimique en phase vapeur (CVI) à gradient thermique : application à l'infiltration de pièces*, Le Ripault.

Olivero BISTONI, *Couplage électron-phonon en utilisant la dynamique moléculaire basée sur la DFT*, DAM Île-de-France.

Benjamin DUFOUR, *Phénoménologie des interactions de plasmas en milieu liquide : application à la fabrication de matériaux pour les cibles laser*, Valduc.

Alexis FORESTIER, *Construction d'un banc de diffusion Brillouin sous chauffage laser pour la mesure de l'équation d'état des prodets : Mesure de la vitesse du son dans quelques fluides moléculaires simples H₂O, N₂ et CO₂ constitutifs des prodets*, DAM Île-de-France.

Adrien FOURMONT, *Mesures expérimentales de capacités calorifiques, de coefficients de diffusion sur plutonium pur et alliages et modélisation de la diffusion dans ces alliages*, Valduc.

Dorota GOTFRYD, *Les forces atomiques pour PAW+DMFT*, DAM Île-de-France.

Laura HENRY, *Microstructure sous conditions extrêmes révélées par la micro-tomographie par diffraction*, DAM Île-de-France.

Antoine HIBERER, *Changement électronique des matériaux sous très haute pression à l'aide d'un banc de mesure réflectivité IR et visible : Application à Au, LiH et Na*, DAM Île-de-France.

Julien MONNIER, *Études expérimentale et numérique du vieillissement thermique de l'alliage inoxydable austénitique 316B*, Valduc.

Corentin PERDERISET, *Étude in situ des mécanismes d'adsorption de molécules gazeuses et d'apparition de produits de corrosion sur matériaux métalliques par PM-IRRAS (spectroscopie infrarouge de réflexion-absorption par modulation de polarisation)*, Valduc.

MATHÉMATIQUES, INFORMATIQUE SCIENTIFIQUE, LOGICIEL

Matthias BARAY, *Développement de méthodes d'éléments finis courbes dans un code couplé volumique-surfacique pour des problèmes de furtivité électromagnétique*, Cesta.

Martin COLVEZ, *Méthodes Galerkin discontinues hybrides pour la propagation sismo-acoustique*, DAM Île-de-France.

Alessia DEL GROSSO, *Analyse des propriétés et extension d'une méthode volume fini multidimensionnelle pour l'aérodynamique hypersonique sur maillages 3D non structurés*, Cesta.

Camille PALMIER, *Traitement SLAM pour la navigation aidée par le terrain (Simultaneous Localization and Mapping)*, Cesta.

Alban VERGNAUD, *Prise en compte de géométries complexes dans un code de frontières immergées par raffinement de maillage en calcul intensif*, Cesta.

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

Vincent FOURNIER, *Étude de la fissuration en régime dynamique*, Cesta.

Nicolas LAFORGE, *Simulation mécanique d'un capteur piézoélectrique et d'un tube à choc d'étalonnage*, DAM Île-de-France.

Corentin LE BRAS, *Modélisation des impacts hypervéloces*, Cesta.

Yoann RAFFRAY, *Modélisation de l'interaction laser-matière pour la simulation des impacts hypervéloces*, Cesta.

OPTIQUE ET OPTRONIQUE

Gilles DALLA BARDA, *Amplification paramétrique optique pour l'injection d'une chaîne laser de puissance*, Cesta.

Pierre Henri DEFIEUX, *Analyse de l'endommagement sur chaîne des optiques de fin de chaîne du LMI*, Cesta.

Paul QUINOMAN, *Modélisation d'un amplificateur laser*, Cesta.

Luis VASQUEZ, *Remédiation d'optique par usinage CO₂*, Cesta.

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE

Maxime BOUVIER, *Dimensionnement d'une chaîne de radiographie X impulsionnelle par contraste de phase pour l'observation d'objets très denses*, DAM Île-de-France.

THERMOHYDRAULIQUE ET MÉCANIQUE DES FLUIDES

Julien AMOROSSETTI, *Phénoménologie des instabilités de choc dans un écoulement gaz-particules*, Cesta.

Clément CAILLAUD, *Calculs de simulation numérique directe en régime hypersonique*, Cesta.

Camille GOUIN, *Modélisation d'écoulements hypersoniques instationnaires (méthodes hybrides RANS-LES)*, Cesta.

Joane MEYNARD, *Modélisation du comportement dynamique de céramiques armées*, Cesta.

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE, PLASMAS

Giacomo ACCORTO, *Scission nucléaire et localisation quantique*, DAM Île-de-France.

Philip BRADFORD, *Exploration des états fortement magnétisés de la matière à haute densité d'énergie*, Cesta.

Clément CAIZERGUES, *Termes sources pour le projet PETAL UPGRADE*, Cesta.

Philippe DA COSTA, *Nouvelle génération de fonctionnelle de la densité pour l'énergie*, DAM Île-de-France.

David DUREL, *Généralisation de la méthode QRPA vis-à-vis de l'extension des codes ISAAC et XPN pour le traitement des noyaux triaxiaux et octupolaires*, DAM Île-de-France.

Cyrille LENAIN, *Mesure des spectres et multiplicités en neutrons prompts de fission de l'uranium 238*, DAM Île-de-France.

Stylios PASSALIDIS, *Étude des instabilités plasma relativistes dans l'interaction laser-plasma et faisceau-plasma*, DAM Île-de-France.

C. Ruyer, A. Fusaro, A. Debayle, R. Capdessus, P. Loiseau, P.-É. Masson-Laborde,
O. Morice [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]

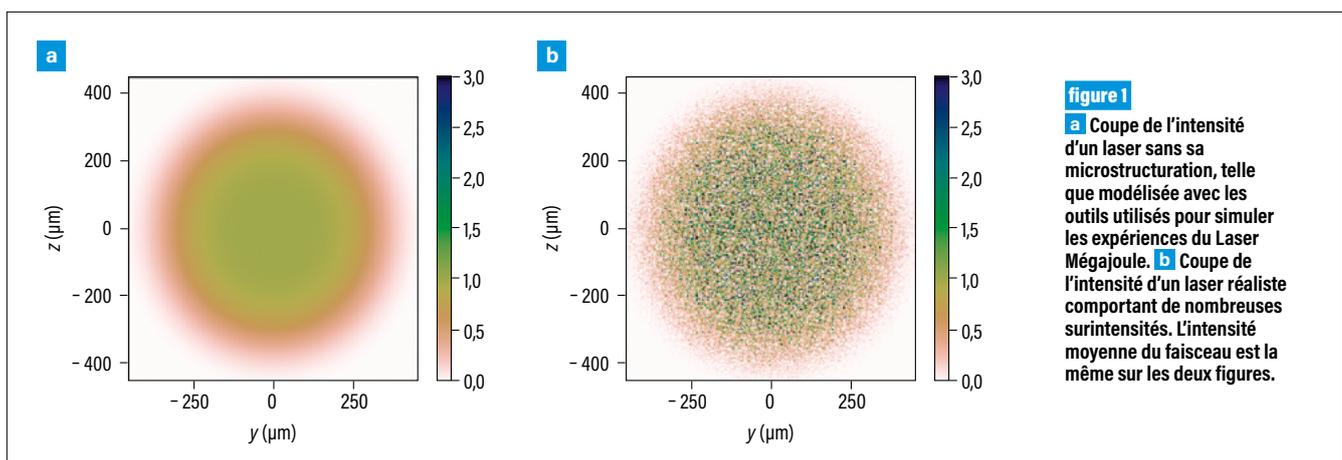
Laser Mégajoule : prise en compte de la microstructuration des faisceaux dans les simulations

Comprendre les expériences conduites sur le Laser Mégajoule et prévoir leurs résultats sont des enjeux majeurs du CEA – DAM. Une équipe de chercheurs vient de proposer un modèle analytique d'interaction laser-plasma permettant de tenir compte de l'influence des surintensités locales que comporte le laser [1,2](#).

Ces développements permettent aussi d'anticiper d'éventuels dommages des optiques.

Les expériences conduites sur le Laser Mégajoule (LMJ) fournissent des données cruciales en astrophysique, en physique de la fusion et plus généralement pour la connaissance de la matière en conditions extrêmes de température et de pression. Les faisceaux laser de haute énergie du LMJ permettent de chauffer la matière et la mettent dans les conditions

requis pour l'obtention de données physiques tant convoitées. La température de la cible atteint des niveaux où les atomes sont partiellement ou entièrement ionisés, créant ainsi un plasma dans lequel le laser se propage. Sa propagation est perturbée par l'interaction entre le laser et le plasma, et une myriade d'effets physiques se produisent, diffusant la lumière dans des directions non désirées. Lorsque ces effets sont trop importants, la matière n'atteint pas les conditions nécessaires à l'expérience. De plus, l'énergie laser diffusée peut endommager les composants optiques de l'installation : c'est le cas de la diffusion arrière dite de Brillouin, particulièrement surveillée à cause de sa dangerosité.



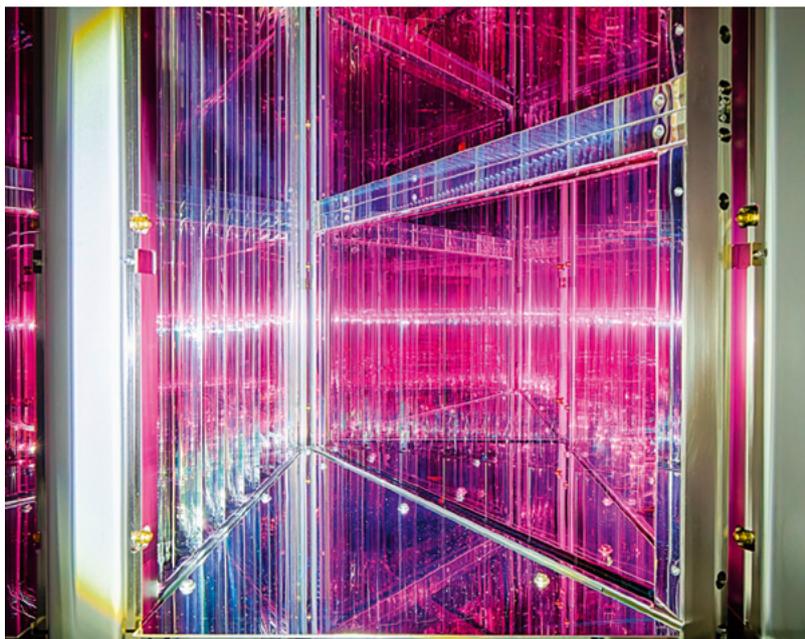


figure 2

Exemple de composant du Laser Mégajoule pouvant être endommagé par une diffusion arrière trop forte au passage des faisceaux : plaque amplificatrice.

La taille des cibles utilisées lors de ces expériences est généralement centimétrique. La tache laser, de l'ordre du millimètre, comporte, elle, des surintensités micrométriques qui peuvent être dix fois plus énergétiques que la moyenne du laser. À cette structuration dite spatiale s'ajoute généralement une structuration temporelle qui met en mouvement les surintensités. Cette complexité liée au laser est négligée dans les simulations qui prévoient et interprètent les expériences conduites sur le LMJ. L'amélioration de la modélisation du laser dans les simulations passe par une prise en compte de la physique en jeu dans le plasma à son passage. La **figure 1** illustre la différence entre un faisceau tel qu'on sait classiquement l'étudier, sans les surintensités, et un faisceau réaliste avec les surintensités.

Nous avons ainsi modélisé finement le laser pour la première fois, en tenant compte analytiquement de l'impact des surintensités sur la portion de l'énergie laser renvoyée vers l'arrière par la diffusion Brillouin. La première étape de la modélisation a donné lieu à une publication **1** qui décrit le formalisme permettant de généraliser à un faisceau laser réaliste les équations bien connues ne tenant pas compte des surintensités. L'effet de la mise en mouvement des surintensités a été pris en compte dans un deuxième article **2**. La théorie développée **1,2** est en bon accord avec des simulations de référence **3**, quelles que soient la composition de la cible et l'installation laser sur laquelle l'expérience est menée. Ainsi, nous avons mis en évidence que les théories qui ne tiennent pas compte des surintensités laser peuvent

sous-estimer l'énergie laser diffusée d'un facteur parfois largement supérieur à dix.

Grâce à ces nouveaux outils de simulation, les physiciens pourront évaluer l'importance de la diffusion Brillouin arrière pour chaque expérience et s'assurer qu'elle n'endommagera pas l'installation (**figure 2**). Ce modèle théorique est applicable à d'autres effets d'interaction entre le laser et le plasma, et ouvre la voie à des outils de simulation toujours plus fidèles à la réalité.

RÉFÉRENCES

- 1** C. Ruyer, A. Fusaro, A. Debayle, R. Capdessus, P. Loiseau, P.-É. Masson-Laborde, « Influence of a random phase plate on the growth of the backward stimulated Brillouin scatter », *Physical Review E*, **107**, 035208 (2023).
- 2** C. Ruyer, A. Fusaro, R. Capdessus, A. Debayle, P. Loiseau, P.-É. Masson-Laborde, O. Morice, « Backward stimulated Brillouin scattering spatial gain with polarization, spatial, and temporal beam smoothing techniques », *Physics of Plasmas*, **30**, 122102 (2023).
- 3** P. Loiseau, O. Morice, D. Teychenné, M. Casanova, S. Hüller, D. Pesme, « Laser-beam smoothing induced by stimulated Brillouin scattering in an inhomogeneous plasma », *Physical Review Letters*, **97**, 205001 (2006).

L. Lecherbourg, V. Recoules [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
P. Renaudin [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France]
F. Dorchies [Centre lasers intenses et applications (Celia), UMR 5107 CNRS – CEA – Université
de Bordeaux, Talence]
K. Ta Phuoc [Laboratoire d'optique appliquée (LOA), UMR 7639 CNRS – École polytechnique –
Ensta Paris, Palaiseau]

Étude du transport d'énergie dans le cuivre chauffé par laser

Au centre de certaines planètes ou dans des objets d'intérêt pour le CEA – DAM, la matière se trouve dans un état thermodynamique dit dense et tiède. Cet état est reproduit en laboratoire grâce à des lasers pour y être étudié. Une équipe de recherche française a développé un dispositif expérimental adapté à la caractérisation de cette matière à l'échelle atomique et obtenu un résultat qui permet de mieux comprendre comment l'énergie est transférée **1**.

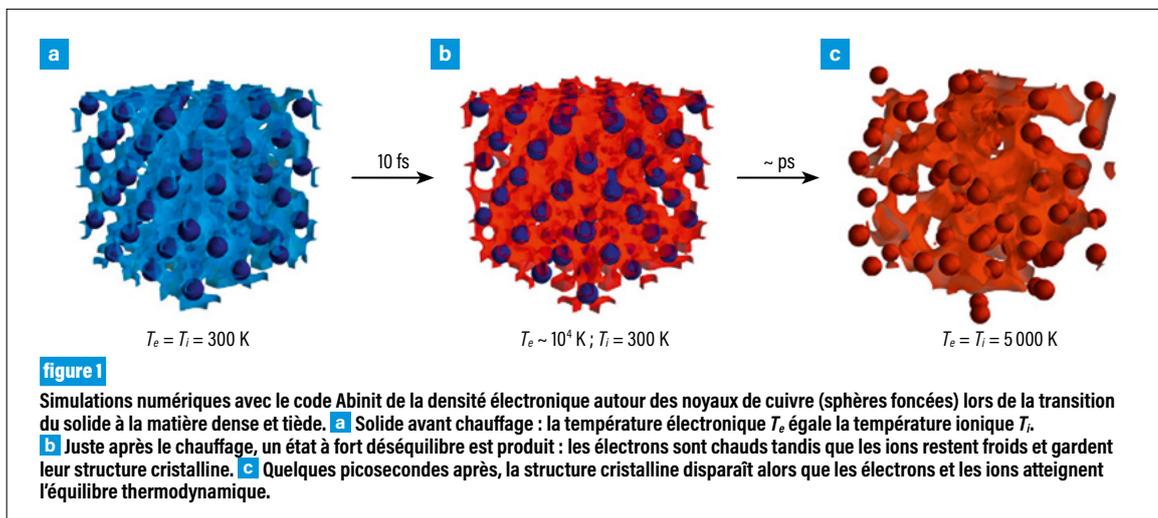
Pour étudier par simulation numérique la formation ou l'évolution des planètes, ou encore le fonctionnement des armes nucléaires, il est fondamental de connaître les propriétés de transport de l'énergie dans la matière à des densités proches ou supérieures à celle du solide et à des températures jusqu'à plusieurs dizaines de milliers de degrés. Dans ce régime dit de la matière dense et tiède, une fraction des électrons est libre et

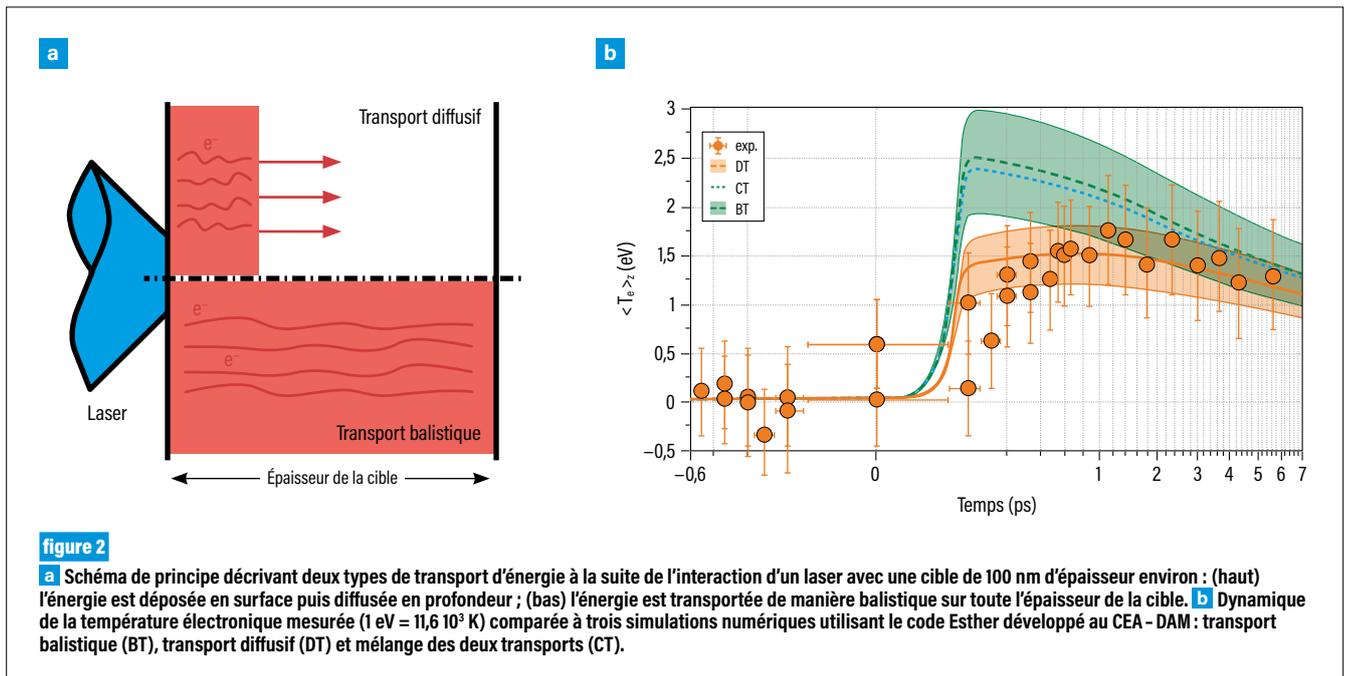
joue un rôle important dans le transport de l'énergie dans la matière. Les physiciens cherchent à mieux quantifier les mécanismes physiques à l'œuvre.

Les propriétés de la matière dans ce régime dépendent très fortement de son état à l'échelle atomique. Les calculs de ces propriétés sont très exigeants, ils nécessitent plusieurs millions d'heures sur les supercalculateurs du CEA – DAM et doivent être validés expérimentalement.

Notre équipe a développé un dispositif expérimental. D'abord, un laser ultracourt permet de chauffer la matière. Ensuite, une source de rayonnement X de durée ultracourte permet de la sonder à l'échelle temporelle de la femtoseconde (10^{-15} seconde) et à l'échelle spatiale de l'atome (10^{-10} m). Enfin, la mesure du spectre d'absorption X de la matière chauffée permet de remonter à ses propriétés.

Le scénario général est le suivant (**figure 1**) : lorsque la matière est chauffée, l'énergie est communiquée rapidement aux électrons, en quelques femtosecondes, puis transférée aux ions et aux autres





électrons en profondeur, en quelques picosecondes, soit à des échelles de temps mille fois plus grandes. Dans les premiers instants après le chauffage, la matière est donc dans un fort déséquilibre thermodynamique, avec des électrons plus chauds que les ions. Le dispositif expérimental développé permet ainsi d'étudier les mécanismes de transport de l'énergie par les électrons seuls.

Deux mécanismes peuvent être mis en jeu : un transport dit balistique et un transport diffusif. Avec un transport balistique, les électrons chauffés par le laser déposent leur énergie en profondeur dans l'échantillon. Avec un transport diffusif, les électrons ne chauffent qu'une fine tranche à la surface de la cible, puis diffusent leur énergie en profondeur sur des échelles de temps plus grandes (figure 2a). Pendant de nombreuses années, le transport d'énergie laser était supposé balistique sur des épaisseurs d'un dixième de micromètre. Chen *et al.* [2] ont récemment démontré expérimentalement qu'à partir d'un certain niveau d'énergie, le mécanisme de transport change. Ils ont supposé que le transport balistique était saturé et qu'un transport diffusif s'ajoutait.

Nous avons revisité cette étude avec notre dispositif expérimental.

Contrairement à ce qui a été réalisé précédemment, ce dispositif a permis pour la première fois de suivre l'évolution temporelle de la température électronique sur une échelle de temps inférieure à la picoseconde [3]. Nous avons étudié les mécanismes de transport d'énergie par les électrons dans un échantillon de cuivre, dans un régime de fort dépôt d'énergie. Afin d'expliquer les résultats obtenus, la mesure de l'évolution de la température est ensuite comparée à trois simulations utilisant différents transports d'énergie : balistique (BT), diffusif (DT) ou un mélange des deux (CT). Cette comparaison a mis en évidence que seul le modèle de transport diffusif permet de reproduire les données (figure 2b). Cela s'explique par le fait qu'à ces énergies, le libre parcours moyen des électrons est faible et que le transport est ainsi purement diffusif. Ce résultat montre que la modification par le laser de l'état électronique de la matière à l'échelle atomique se répercute en des temps inférieurs à une dizaine de femtosecondes sur les propriétés macroscopiques comme le coefficient de conduction thermique.

Cette expérience démontre le potentiel du nouveau système expérimental développé. Ce dernier permet d'étudier les phénomènes physiques ultrarapides

dans la matière dense et tiède [1]. De nombreuses expériences peuvent à présent être imaginées afin d'étudier d'autres types de matériaux ou de changer les conditions laser pour déclencher de nouveaux effets, ou encore d'étudier les mécanismes d'interaction entre les électrons et les ions.

RÉFÉRENCES

- [1] L. Lecherbourg, V. Recoules, P. Renaudin, F. Dorchies, « Dynamics of femtosecond heated warm dense copper with time-resolved L3-edge XANES », *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **381**, 20220214 (2023).
- [2] Z. Chen *et al.*, « Flux-limited nonequilibrium electron energy transport in warm dense gold », *Physical Review Letters*, **108**, 165001 (2012).
- [3] A. Grolleau, F. Dorchies, N. Jourdain *et al.*, « Femtosecond resolution of the nonballistic electron energy transport in warm dense copper », *Physical Review Letters*, **127**, 275901 (2021).

Quelle deuxième chance pour la fission nucléaire ?

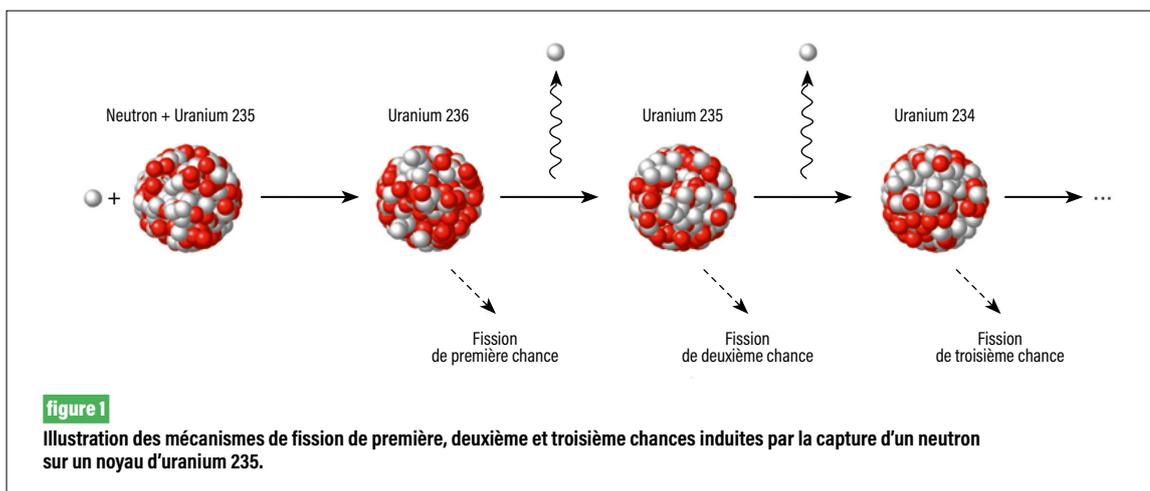
Percutés par des neutrons, certains noyaux d'atomes peuvent se scinder en deux : c'est la fission nucléaire. Libérant une énergie extraordinaire, la fission est la source d'énergie des réacteurs électronucléaires et des armes de dissuasion. Elle peut prendre plusieurs visages, dont le plus connu est la fission dite de première chance. À partir des indices que la fission dite de deuxième chance laisse dans les données expérimentales, une équipe de chercheurs du CEA – DAM est remontée pour la première fois à sa probabilité de survenue **1**.

Depuis la découverte de la fission en 1938, les expériences de physique nucléaire ont permis de se faire une idée assez précise du phénomène. Un noyau, par exemple de l'uranium 235, capture un neutron. Le noyau d'uranium 236 ainsi formé peut se diviser en deux fragments éjectés à grande vitesse. Les fragments percutent les noyaux environnants et leur énergie cinétique est convertie en chaleur. La fission d'un gramme de plutonium fournit autant d'énergie que la combustion d'une

tonne de pétrole – un facteur colossal qui explique l'intérêt pour les applications civiles et militaires. Les fragments libèrent aussi des rayonnements électromagnétiques ainsi que des neutrons qui engendrent une réaction en chaîne.

La fission est un phénomène quantique par nature : ses propriétés ne sont pas déterminées à l'avance. Par exemple, le nombre de neutrons émis n'est pas toujours le même ; la survenue de la fission n'est pas non plus certaine. Après la capture d'un neutron, le noyau d'uranium 235 se transforme en uranium 236, qui peut fissionner : c'est la fission de première chance. Il peut aussi émettre un neutron pour redonner un noyau d'uranium 235. Dans ce cas, si l'énergie du neutron émis est plus faible que l'énergie du neutron initial, alors ce noyau peut fissionner : c'est la fission de deuxième chance. La coexistence de ces deux voies est illustrée sur la **figure 1** qui présente également la fission de troisième chance, c'est-à-dire la fission de l'uranium 234, produit à la suite de l'émission d'un neutron par le noyau d'uranium 235.

Nous avons montré que la fission de deuxième chance, loin d'être anecdotique, devient majoritaire pour les neutrons incidents de plus de quelques mégaelectronvolts (MeV). La nature se joue alors du physicien qui pense avoir affaire à la fission de l'uranium 236 alors qu'il peut s'agir de la fission de



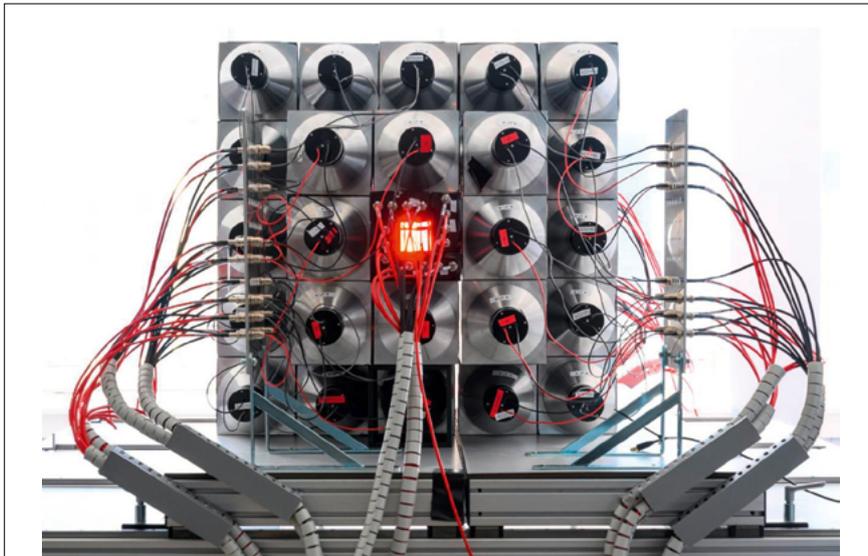


figure 2
Photographie du détecteur Scone du CEA - DAM qui compte les neutrons émis lors de la fission de l'échantillon d'uranium 235 placé au centre (en rouge) quand il est percuté par un faisceau de neutrons.

l'uranium 235 – ce qui suffit à changer considérablement les propriétés de la fission. Quelle est la proportion de ces fissions de deuxième chance ? Expérimentalement, lorsqu'une fission se produit, il est impossible de dire s'il s'agit d'une fission de première ou de deuxième chance : les processus mis en jeu sont trop rapides pour les distinguer avec les dispositifs actuels.

Depuis les années 1960, le CEA - DAM poursuit un programme expérimental basé sur l'utilisation de

compteurs de neutrons de près d'une tonne. Historiquement, plusieurs générations de compteurs se sont succédé depuis les années 1960, jusqu'au tout récent compteur Scone (figure 2). Ces détecteurs ont la faculté exceptionnelle de compter les neutrons de fission un par un avec une efficacité d'environ 80 %. Ainsi, la physique nucléaire doit à ces détecteurs les distributions du nombre de neutrons émis à la fission de nombreux actinides [2]. La correction des 20 % de neutrons perdus est *a priori*

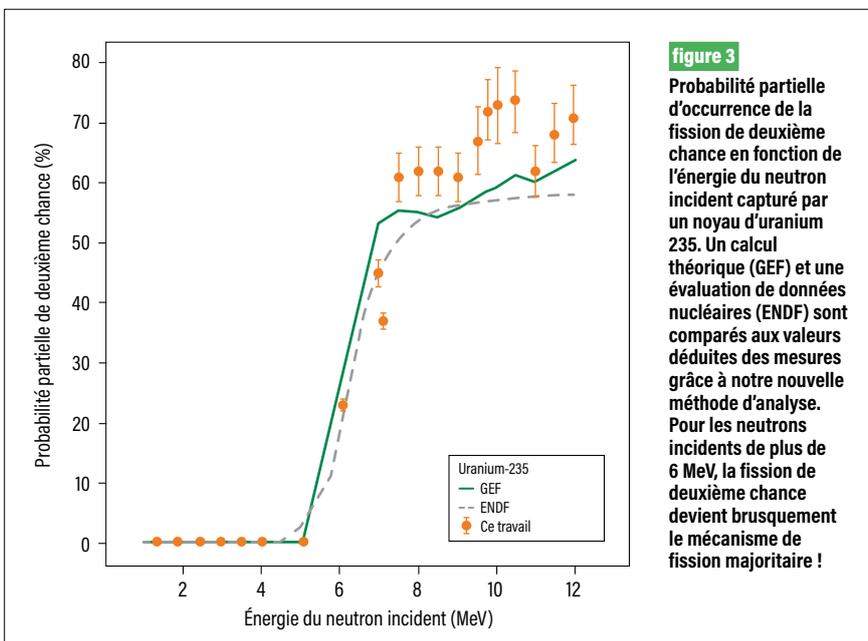


figure 3
Probabilité partielle d'occurrence de la fission de deuxième chance en fonction de l'énergie du neutron incident capturé par un noyau d'uranium 235. Un calcul théorique (GEF) et une évaluation de données nucléaires (ENDF) sont comparés aux valeurs déduites des mesures grâce à notre nouvelle méthode d'analyse. Pour les neutrons incidents de plus de 6 MeV, la fission de deuxième chance devient brusquement le mécanisme de fission majoritaire !

un problème simple. Malheureusement, pour les neutrons incidents de haute énergie, le nombre de neutrons émis est si grand que les solutions qui en sont déduites ne sont pas physiques. Par conséquent, au-delà de quelques MeV, seul le nombre moyen de neutrons émis a été extrait sans que les distributions de probabilité soient obtenues [3].

En travaillant sur les dernières expériences menées avec le détecteur Scone, une équipe du CEA - DAM a développé une méthode permettant d'obtenir une solution physique. Comme pour résoudre un *cold case*, ils ont appliqué cette méthode à des données archivées depuis les années 1980 ! Ils sont ainsi remontés aux distributions du nombre de neutrons émis par la fission de l'uranium 235 et du plutonium 239 jusqu'à 15 MeV. À la surprise générale, ces distributions portent une signature unique de la fission de deuxième chance permettant d'en estimer la probabilité sans faire appel à des modèles [1]. Le résultat pour l'uranium 235 semble conforter les évaluations, comme le montre la figure 3. En deçà de 6 MeV, le mécanisme de deuxième chance est négligeable. Brusquement, au-delà de 6 MeV, il représente la majorité des fissions. Dans un futur proche, l'analyse des données acquises avec le détecteur Scone devrait conduire à de nouveaux résultats pour d'autres actinides et peut-être, un jour, faire tomber le masque de la fission de troisième chance.

RÉFÉRENCES

- [1] B. Fraisse, G. Bélier, V. Méot, L. Gaudetroy, A. Francheteau, O. Roig, « Complete neutron-multiplicity distributions in fast-neutron-induced fission », *Phys. Rev. C*, **108**, 014610 (2023).
- [2] B. C. Diven, H. C. Martin, R. F. Taschek, J. Terrell, « Multiplicities of fission neutrons », *Phys. Rev.*, **101**, p. 1012-1015 (1956).
- [3] M. Soleilhac, J. Fréhaut, J. Gauriau, « Energy dependence of ν_p for neutron-induced fission of ^{235}U , ^{238}U and ^{239}Pu from 1.3 to 15 MeV », *J. Nucl. Energy*, **23**, p. 257-282 (1969).

S. Hilaire [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]
A. J. Koning [Agence internationale à l'énergie atomique (AIEA), Vienne, Autriche]
S. Goriely [Université libre de Bruxelles, Bruxelles, Belgique]

Talys : un programme informatique qui ne laisse aucun physicien nucléaire à quai !

Développé conjointement par l'Agence internationale à l'énergie atomique (AIEA), l'Université libre de Bruxelles et le CEA – DAM, le programme Talys est un des outils les plus utilisés pour décrire les réactions nucléaires. Il permet en effet de calculer l'ensemble des résultats possibles lorsqu'une particule entre en collision avec un noyau atomique. Il est utilisé à travers le monde pour des applications aussi diverses que l'astrophysique, l'évaluation des données nucléaires pour les réacteurs ou des études relatives à la production de radio-isotopes médicaux. Sa polyvalence lui permet aussi bien de décrire très précisément des réactions d'importance majeure que de tester les meilleures théories microscopiques en les confrontant aux données expérimentales. L'aboutissement d'une vingtaine d'années de travaux a récemment été couronné par une publication de référence ¹.

Prévoir l'issue d'une réaction nucléaire nécessite d'utiliser plusieurs modèles physiques complexes dont la mise en œuvre requiert un vaste ensemble d'informations de base, par exemple la masse des noyaux concernés. Ces informations sont au programme informatique ce que le carburant est au moteur. En disposer est un préalable pour qu'il remplisse ses fonctions.

Vers la fin des années 2000, les programmes informatiques, appelés codes, destinés à prévoir l'ensemble des résultats d'une réaction nucléaire étaient essentiellement nourris à la main par l'utilisateur. Celui-ci devait préciser un ensemble de données chiffrées requis par les modèles programmés dans le code pour le faire fonctionner. Avant même de pouvoir calculer quoi que ce soit, un travail fastidieux de collecte et de mise en forme était donc nécessaire. Les différents modèles étaient eux aussi souvent traités par des codes différents nécessitant un interfaçage,

source de complications supplémentaires. Pour simplifier les choses, le développement du code Talys a été engagé en 1998 avec trois objectifs. Tout d'abord, disposer dans un seul outil de l'ensemble des modèles de réaction nécessaires. D'autre part, réduire au strict minimum le travail de l'utilisateur souhaitant lancer une étude. Et enfin anticiper et permettre à moindres frais la prise en compte des avancées dans le domaine.

Initialement mené dans le cadre d'une collaboration franco-hollandaise impliquant l'institut NRG (Nuclear Research & Consultancy Group) de Petten aux Pays-Bas et le CEA – DAM, ce développement se poursuit désormais dans un cadre tripartite avec l'AIEA, l'Université libre de Bruxelles et le CEA – DAM. Le code Talys intègre les principaux modèles nécessaires à la description des réactions nucléaires induites par des particules comme le neutron.

Les informations requises par chacun des modèles, quant à elles, sont disponibles dans une base de données fournie avec le code. Initialement issue d'un long travail de compilation réalisé sous l'égide de l'AIEA entre les années 1990 et 2010 ², cette base de données s'est enrichie au fil du temps de nouvelles options rendues possibles par différents développements théoriques.

L'utilisation de Talys repose sur un ensemble de mots clés nécessaires à la description du problème étudié. Pour lancer une étude, il suffit de préciser quatre mots clés : les quatre informations de base d'une réaction, à savoir le nom de la cible, sa masse, le projectile et son énergie. Si des résultats d'une grande qualité sont attendus (on parle d'évaluations ³), pour des applications nucléaires industrielles ou médicales par exemple, de nombreux mots clés supplémentaires permettent à l'utilisateur averti

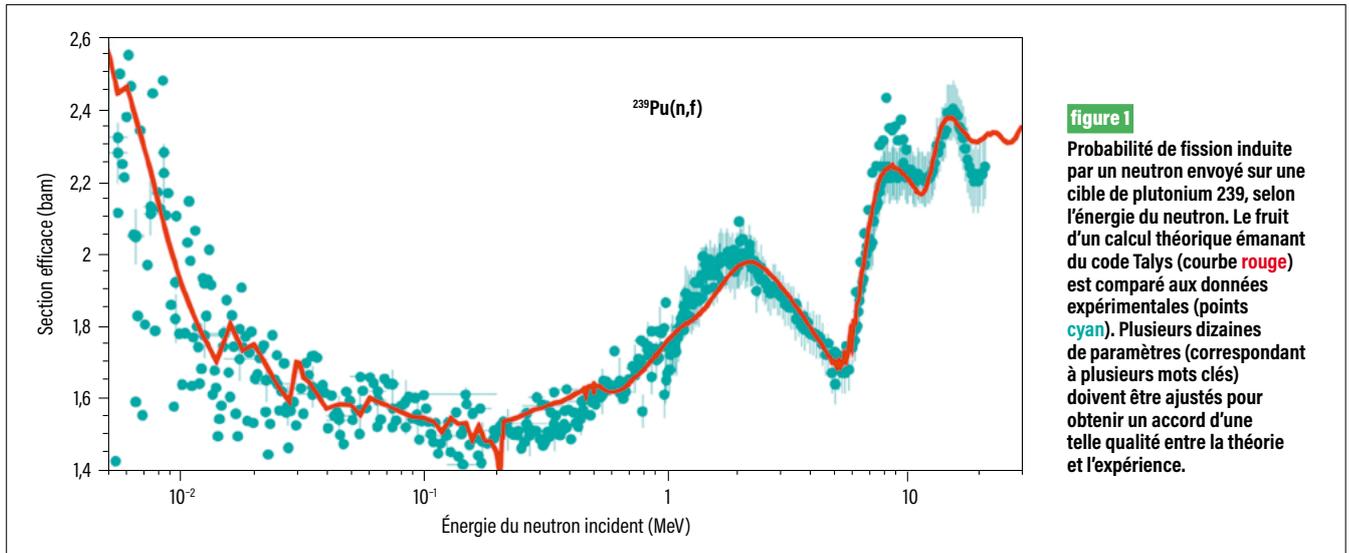


figure 1
 Probabilité de fission induite par un neutron envoyé sur une cible de plutonium 239, selon l'énergie du neutron. Le fruit d'un calcul théorique émanant du code Talys (courbe rouge) est comparé aux données expérimentales (points cyan). Plusieurs dizaines de paramètres (correspondant à plusieurs mots clés) doivent être ajustés pour obtenir un accord d'une telle qualité entre la théorie et l'expérience.

d'ajuster au mieux les divers paramètres du calcul pour reproduire finement les expériences (figure 1) et prévoir ce qui n'a pas été mesuré.

Un second mode d'utilisation, illustré sur la figure 2, a une vocation plus académique. L'objectif n'est plus cette fois de reproduire précisément les mesures, mais de trancher

entre plusieurs options permettant d'aborder un même problème. C'est le cas des recherches impliquant des centaines de noyaux peu connus sur le plan expérimental, telles que les études portant sur la formation des noyaux au sein des étoiles. Dans ce cas, le choix d'un modèle pour explorer des zones inconnues s'appuie sur sa capacité à

bien décrire les données connues. Pour reprendre l'analogie avec le moteur, on teste plusieurs sortes de carburant pour choisir le plus performant.

En raison de sa simplicité d'utilisation et des multiples options d'ajustement qu'il offre aux utilisateurs chevronnés, le code de réaction Talys est aujourd'hui largement utilisé dans le monde. Il sert aussi bien pour les applications qui exigent un haut degré de précision que pour celles qui nécessitent des résultats d'une qualité raisonnable pour un grand nombre de noyaux.

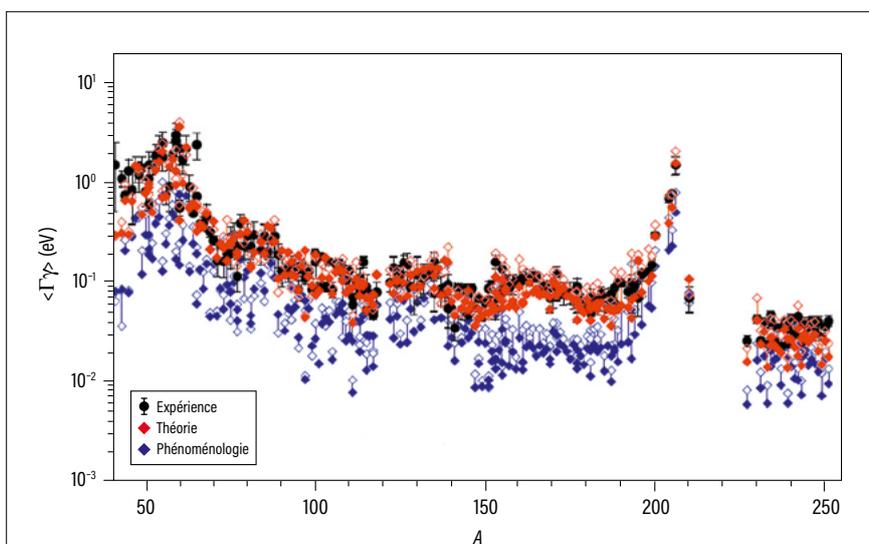


figure 2
 Largeur radiative $\langle \Gamma_\gamma \rangle$ (reflet de la probabilité de capture d'un neutron lent par un noyau) en fonction du nombre A de nucléons des noyaux cibles. Deux modèles globaux (c'est-à-dire non ajustés au cas par cas) sont comparés aux données expérimentales disponibles. Le modèle phénoménologique correspond à l'approche utilisée traditionnellement sur ordinateur sans calculs lourds. Le modèle théorique est le fruit de développements de pointe rendus possibles par les puissants moyens de calcul modernes comme ceux du CEA - DAM (voir 4 pour plus de détails).

RÉFÉRENCES

- 1 A. J. Koning, S. Hilaire, S. Goriely, « TALYS: Modeling of nuclear reactions », *The European Physical Journal A*, **59**, 131, <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-023-01034-3> (2023).
- 2 R. Capote et al., « RIPL – Reference input parameter library for calculation of nuclear reactions and nuclear data evaluations », *Nuclear Data Sheets*, **110**, p. 3107-3214, <https://doi.org/10.1016/j.nds.2009.10.004> (2009).
- 3 A. J. M. Plompen et al., « The Joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3 », *The European Physical Journal A*, **56**, 181, <https://doi.org/10.1140/epja/s10050-020-00141-9> (2020).
- 4 S. Goriely et al., « Reference database for photon strength functions », *The European Physical Journal A*, **55**, 172, <https://doi.org/10.1140/epja/i2019-12840-1> (2019).

J.-P. Ebran [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France

Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire matière en conditions extrêmes (LMCE), Bruyères-le-Châtel]

T. Duguet, V. Somà [CEA – DRF, Institut de recherche sur les lois fondamentales de l'Univers (Irfu), Gif-sur-Yvette]

M. Frosini [CEA – DES, Institut de recherche sur les systèmes nucléaires pour la production d'énergie bas carbone (Iresne), Saint-Paul-lès-Durance]

Explorer le territoire nucléaire en partant des premiers principes de la physique

Une collaboration regroupant des chercheurs de trois directions du CEA a repoussé les limites des théories les plus rigoureuses de la physique nucléaire théorique ¹⁻³. Il est désormais possible, à partir des premiers principes de la physique, donc de la manière la plus robuste qui soit, de saisir la diversité des schémas d'organisation des protons et des neutrons au sein du noyau.

Telles des poupées gigognes, notre monde présente des structures emboîtées les unes dans les autres. La matière est ainsi composée d'atomes, l'atome fait intervenir des électrons et un noyau, le noyau résulte de l'union de nucléons (protons et neutrons), le nucléon est un assemblage de quarks et l'avenir nous dira si le quark lui-même est constitué de nouvelles entités. Le physicien cherche à construire une description robuste des phénomènes pour chacune de ces strates du réel. Une méthode pour y parvenir consiste à s'assurer que les lois de la physique s'héritent d'un niveau d'organisation à un autre. On parle alors, pour chaque niveau, d'une description effective dite *ab initio*, c'est-à-dire partant des principes premiers de la physique.

Dans cet enchaînement de structures, le noyau atomique se distingue par sa situation singulière. Il occupe un volume infime – sa taille est 100 000 fois plus petite que celle de l'atome – mais porte 99,9 % de sa masse. Le noyau est ainsi un système extrêmement dense soumis à des forces puissantes qui en assurent la cohésion et dont le comportement est régi par les lois de la mécanique quantique. De telles caractéristiques font du noyau un objet complexe : ses constituants, les nucléons, sont intensément corrélés, c'est-à-dire que le comportement d'un nucléon dépend fortement de celui des autres. Ces corrélations nucléoniques sont à l'origine de la richesse des phénomènes nucléaires. Les nucléons peuvent ainsi garder

leur individualité et se répartir dans le noyau selon diverses formes, ou alors former des couples, voire de plus grandes équipes appelées clusters. Lorsque de l'énergie est injectée dans le noyau, elle peut être monopolisée par un petit nombre de nucléons ou bien partagée par tous, donnant lieu à des phénomènes collectifs agitant le noyau entier sous forme de rotations couplées à des vibrations.

Tous ces comportements influent sur les propriétés des noyaux, dont une modélisation fiable est indispensable aussi bien pour aboutir à une compréhension fondamentale de l'organisation de la matière à l'échelle nucléaire que pour exploiter de façon maîtrisée les processus nucléaires en vue d'applications technologiques. Et pourtant, une telle modélisation pose un véritable défi aux physiciens. En effet, les propriétés d'un système quantique se déduisent de sa « fonction d'onde », dont le carré du module donne la probabilité de présence des nucléons dans l'espace. Or, les fortes corrélations nucléoniques rendent la fonction d'onde nucléaire coûteuse en ressources numériques : alors qu'il existe environ 7 000 noyaux (les plus gros font intervenir autour de 300 nucléons), seule la fonction d'onde d'une trentaine (composés d'au plus 16 nucléons) est accessible exactement en raison du coût de calcul rédhibitoire, et ce même en utilisant les superordinateurs du CEA – DAM. Quelle stratégie adopter alors pour explorer une plus large portion du territoire nucléaire ?

Historiquement, les physiciens ont étendu la portée des approches nucléaires quitte à fragiliser leur fiabilité à travers l'introduction d'ingrédients empiriques dans leur formulation. D'un côté, le passage de l'échelle des quarks à celle des nucléons ne s'appuie plus sur les lois de la physique. De l'autre, le coût de calcul d'une fonction d'onde nucléaire est fortement réduit, si bien que ces modèles phénoménologiques peuvent aujourd'hui être appliqués à l'ensemble du

territoire nucléaire. Mais leur précision et leur pouvoir prédictif se dégradent à mesure que l'on s'aventure au-delà de ses régions expérimentalement connues. De plus, il est impossible d'estimer de manière robuste les incertitudes du calcul. Les efforts actuels de la communauté consistent à améliorer la fiabilité de ce type d'approche.

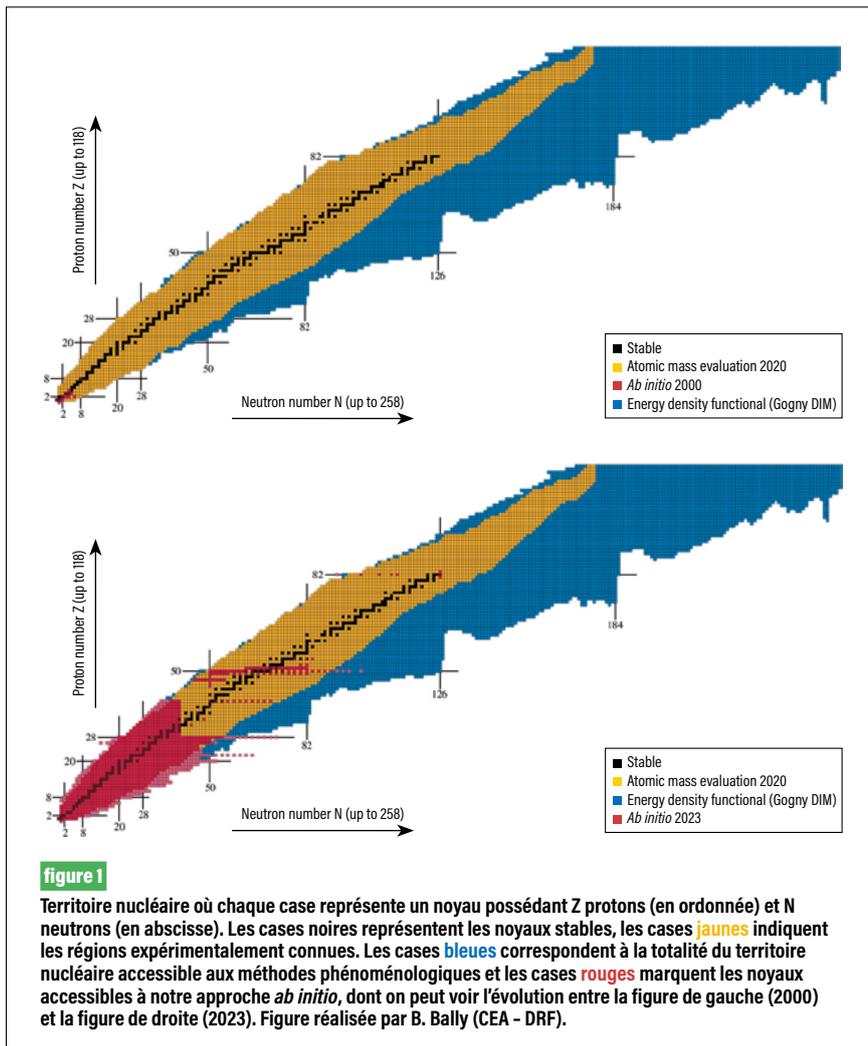
Une autre voie est explorée avec succès depuis une dizaine d'années dans le cadre d'une collaboration entre directions du CEA. Elle consiste à conserver un pouvoir prédictif maximal des approches nucléaires en retenant

une formulation *ab initio*. Le coût du calcul de la fonction d'onde nucléaire est significativement réduit ; l'incertitude induite est faible et peut être évaluée.

C'est la possibilité de classer les corrélations nucléoniques en plusieurs catégories d'importance inégale qui permet une telle réduction. Plutôt que d'essayer de prendre en compte en une seule fois l'ensemble des corrélations, ce qui donne lieu à un coût de calcul exponentiellement croissant, il est plus intéressant d'introduire ces corrélations par étapes, en commençant par celles qui dominent les propriétés des

noyaux. Une telle procédure permet de contrôler la complexité numérique associée aux fonctions d'onde nucléaires et d'étendre significativement la portée des approches *ab initio*.

Les nouvelles méthodes développées permettent ainsi de décrire environ 800 noyaux, comprenant jusqu'à une centaine de nucléons, y compris les noyaux avec des comportements collectifs comme les rotations et les vibrations (figure 1). Par ailleurs, alors que certaines approches *ab initio* sont restreintes aux propriétés des noyaux dans leur état quantique de plus basse énergie, notre approche peut également décrire les excitations nucléaires, notamment les résonances géantes 1 dans lesquelles les nucléons oscillent collectivement, et les rotations nucléaires 2. Notre approche donne de meilleurs résultats que l'approche phénoménologique. La collaboration travaille désormais à étendre encore davantage le domaine d'applicabilité des approches *ab initio* 3.



RÉFÉRENCES

1 Y. Beaujeault-Taudière, M. Frosini, J.-P. Ebran, T. Duguet, R. Roth, V. Somà, « Zero- and finite-temperature electromagnetic strength distributions in closed- and open-shell nuclei from first principles », *Phys. Rev. C*, **107**, L021302 (2023).
 2 M. Frosini, T. Duguet, J.-P. Ebran, V. Somà, « Multi-reference many-body perturbation theory for nuclei- I. Novel PGCM-PT formalism », *Eur. Phys. J. A*, **58**, 62 (2022).
 3 T. Duguet, J.-P. Ebran, M. Frosini, H. Hergert, V. Somà, « Rooting the EDF method into the ab initio framework PGCM-PT formalism based on MR-IMSRG pre-processed Hamiltonians », *Eur. Phys. J. A*, **59**, p. 13 (2022).

Sommerfeld dicte toujours sa loi aux électrons !

Il y a près d'un siècle, le physicien allemand Arnold Sommerfeld faisait des prédictions très utiles pour décrire les propriétés thermiques des électrons dans les métaux. Aujourd'hui, nos moyens permettent une description fine du comportement chimique ou électrique des matériaux. Et pourtant, les résultats de Sommerfeld restent valables malgré ses hypothèses simplificatrices. Nous avons vérifié ses prédictions et décrit dans quels domaines de température et de densité elles s'appliquent **1**.

En 1928, Arnold Sommerfeld remporte un grand succès : il développe un modèle expliquant la conductivité des métaux. Il s'appuie sur le modèle de conductivité électrique du physicien allemand Paul Drude. Avec une différence fondamentale : alors que le modèle de Drude reposait uniquement sur la physique classique, Sommerfeld y introduit de la mécanique quantique.

Ce qu'il ajoute au modèle, c'est le principe d'exclusion de Pauli. Ce principe stipule que deux électrons ne peuvent pas occuper le même « état quantique »,

c'est-à-dire qu'ils ne peuvent pas avoir exactement les mêmes propriétés et la même énergie. Pour arriver à ses fins, Sommerfeld fait cependant des hypothèses audacieuses. Il suppose que les électrons n'interagissent ni entre eux ni avec les noyaux atomiques ! Autrement dit, les effets quantiques sont tellement forts qu'ils supplantent largement les interactions (pourtant puissantes) entre particules chargées.

Les physiciens et les chimistes ont besoin, pour comprendre le comportement des matériaux, de s'intéresser à l'énergie des électrons. Comme les aspects quantiques sont très présents à l'échelle microscopique, l'énergie de ces électrons ne peut parfois prendre que certaines valeurs : on parle de niveaux d'énergie. Comme les gouttes d'eau d'une mer dont la hauteur représenterait l'énergie, les électrons « s'empilent » du fond vers la surface (une image qu'on doit au physicien italien Enrico Fermi). Le niveau de plus haute énergie (à la surface de la mer) s'appelle le niveau de Fermi, noté ϵ_F .

Quand la température n'est pas nulle, les électrons peuvent avoir des énergies un peu plus élevées que le niveau de Fermi ϵ_F . Mais il s'agit seulement de ceux qui sont proches de la surface, un peu comme l'écume des vagues par grand vent. Nous avons représenté sur la **figure 1** la probabilité d'occupation des niveaux

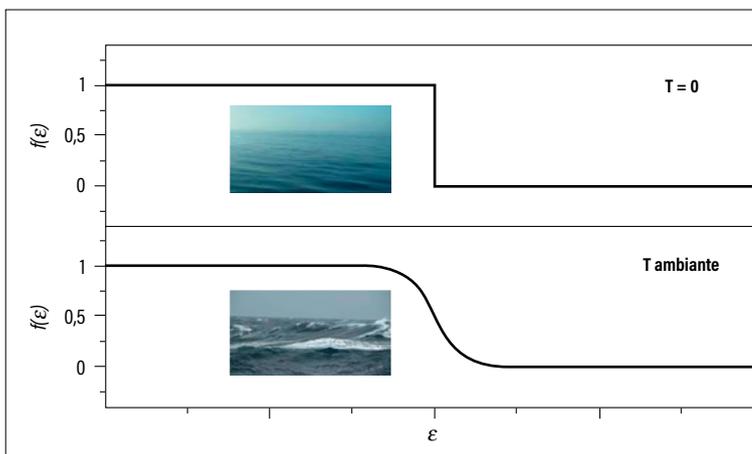


figure 1
Probabilité d'occupation $f(\epsilon)$ des niveaux d'énergie de la mer de Fermi. Tous les niveaux sont occupés par des électrons jusqu'à la surface par temps calme, à température nulle ($T = 0$). À température ambiante, des niveaux au-dessus de la surface peuvent être occupés par des électrons venant de la surface, formant comme des vagues et de l'écume. Sommerfeld utilise cette fonction pour prédire les propriétés thermiques des électrons dans un métal.

d'énergie, $f(\epsilon)$, à température nulle et à température ambiante. Sommerfeld a utilisé cette fonction, appelée distribution de Fermi-Dirac, pour prédire avec succès l'effet de la température sur les propriétés des électrons dans un métal: la conductivité, mais aussi les grandeurs thermodynamiques comme l'énergie, la pression et l'entropie pour ce qui nous a intéressés ici.

Pourquoi la DAM s'intéresse-t-elle à ces calculs presque centenaires? Dans nos applications, nous faisons parfois face à de gigantesques variations de température et nous voulons savoir comment les matériaux se comportent dans ces conditions, par exemple à quelle température le métal devient liquide.

Sommerfeld savait sans doute à quel point ses hypothèses étaient risquées, mais s'en passer n'était pas facile à l'époque. On ne peut pas négliger les interactions coulombiennes, comme il le fait dans son modèle de « gaz d'électrons libres ». Dans un métal, la plupart des électrons restent liés aux noyaux des atomes.

Seuls quelques-uns, appelés électrons de conduction, circulent dans tout le matériau. Lorsqu'on chauffe ou

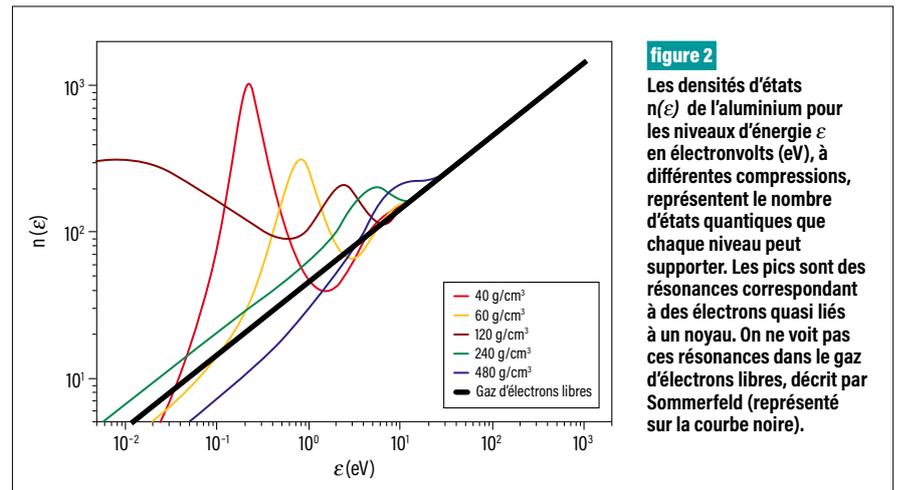
que l'on comprime le métal, certains électrons liés peuvent devenir libres et participer à la conduction électrique. Le calcul des niveaux d'énergie est donc bien plus complexe que ce que proposait Sommerfeld.

En fait, Sommerfeld ne prédit pas les bonnes valeurs de l'entropie parce qu'il calcule mal le nombre d'états quantiques d'un niveau d'énergie. En effet, comme l'entropie est une mesure du désordre, elle sera différente si un niveau d'énergie occupé par un seul électron comprend deux ou dix états quantiques. Dans un cas, l'électron a le choix entre deux états, et dans l'autre cas, il a le choix entre dix états, ce qui augmente le désordre possible. Le décompte du nombre d'états quantiques de chaque niveau d'énergie est représenté par une « densité d'états ».

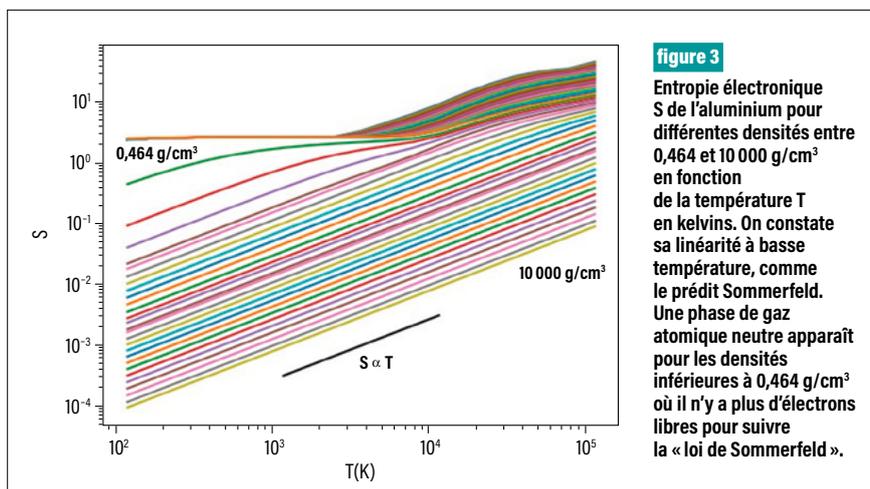
Lorsqu'on prend en compte les effets quantiques et l'interaction coulombienne, on obtient des courbes

de « densités d'états » représentées sur la **figure 2**. On observe des pics dans la densité d'états qu'on appelle « résonances ». Ces résonances correspondent à des situations où un électron qui était lié est devenu libre quand la compression a augmenté. Mais si la compression n'est pas trop forte, il revient de temps en temps faire un tour autour du noyau qu'il avait quitté. Progressivement, à mesure que la compression augmente, il subit de moins en moins l'attraction de ce noyau et la résonance disparaît.

Malgré ces différences entre le gaz d'électrons libres imaginé par Sommerfeld et la réalité, les dépendances en température prédites par Sommerfeld restent vérifiées parce que la densité d'états varie très peu avec la température. Dans notre étude sur l'entropie, on retrouve une augmentation linéaire avec la température. La **figure 3** illustre ce résultat et montre aussi que l'approximation de Sommerfeld n'est valable qu'à basse température et à forte densité. La suite de nos travaux portera sur l'influence de la structure cristalline qui n'est pas prise en compte dans le modèle isotrope, c'est-à-dire à symétrie sphérique, de l'atome moyen que nous avons utilisé.


figure 2

Les densités d'états $n(\epsilon)$ de l'aluminium pour les niveaux d'énergie ϵ en électronvolts (eV), à différentes compressions, représentent le nombre d'états quantiques que chaque niveau peut supporter. Les pics sont des résonances correspondant à des électrons quasi liés à un noyau. On ne voit pas ces résonances dans le gaz d'électrons libres, décrit par Sommerfeld (représenté sur la courbe noire).


figure 3

Entropie électronique S de l'aluminium pour différentes densités entre 0,464 et 10 000 g/cm^3 en fonction de la température T en kelvins. On constate sa linéarité à basse température, comme le prédit Sommerfeld. Une phase de gaz atomique neutre apparaît pour les densités inférieures à 0,464 g/cm^3 où il n'y a plus d'électrons libres pour suivre la « loi de Sommerfeld ».

RÉFÉRENCE

1 P. Arnault, J. Racine, J.-P. Raucourt, A. Blanchet, J.-C. Pain, « Sommerfeld expansion of electronic entropy in an Inferno-like average atom model », *Physical Review B*, **108**, 085115 <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.085115> (2023).

Comprendre la Terre en laboratoire

Le seul moyen d'observer l'intérieur de la Terre est de mesurer et d'interpréter les ondes sismiques qui le traversent. Pour cela, il est nécessaire de connaître la réponse élastique de la forme du fer constitutive du noyau interne de la Terre. Encore faut-il disposer d'un échantillon bien particulier de cette forme de fer. Une équipe du CEA – DAM a justement synthétisé pour la première fois de tels cristaux de fer **1**. Les mesures effectuées permettent de mieux comprendre le noyau de la Terre, et en même temps de valider les codes du CEA – DAM simulant la matière dans une large gamme de température et de pression.

Personne n'a visité le noyau de la Terre, sa couche la plus profonde constituée essentiellement de fer. Tout ce que l'on en sait (**figure 1**) provient d'observations indirectes, telles que la vitesse et la trajectoire des ondes sismiques provoquées par les tremblements de terre qui se propagent de part et d'autre de la planète. Ces ondes sismiques se propagent de manière élastique, c'est-à-dire par des déformations réversibles de la matière sous l'effet de variations de pression. C'est donc à partir de la réponse élastique des roches traversées qu'on peut interpréter les mesures de sismologie. Les chercheurs ont ainsi compris il y a plusieurs décennies qu'un noyau externe liquide entoure un noyau interne, appelé graine, qui est sous forme solide à plusieurs millions de fois la pression atmosphérique. Mais la graine reste mystérieuse à bien des égards. L'une de ses caractéristiques les plus frappantes, découverte dans les années 1980, est qu'elle est anisotrope : les ondes sismiques qui se déplacent d'un pôle à l'autre la traversent environ 4 % plus vite que celles qui voyagent suivant le plan de l'équateur. Comment expliquer cette particularité ? Que nous dit-elle sur la composition, la structure de la graine ?

On se heurte à un obstacle pour comprendre : les propriétés élastiques de la forme du fer qui constitue la graine n'ont jamais pu être mesurées. Et les vitesses

des ondes sismiques dépendent directement de ces propriétés élastiques...

L'atteinte en laboratoire des pressions et des températures du noyau est possible aujourd'hui grâce à des dispositifs tels que la cellule à enclumes de diamant chauffée par laser ou la compression par onde de choc. Mais la mesure des propriétés élastiques pose un problème supplémentaire, car elle nécessite de disposer d'un échantillon sous forme de monocristal, c'est-à-dire un assemblage où tous les atomes sont disposés suivant une grille (ou réseau) tridimensionnelle spécifique.

Une équipe du CEA – DAM vient de franchir une étape importante. La forme de fer notée ϵ -Fe, forme stable dans les conditions extrêmes de la graine, a été synthétisée avec une qualité suffisante pour mesurer ses propriétés élastiques **1**. Ces mesures constituent un point de référence indispensable pour les modèles théoriques. Elles ouvrent la voie à d'autres expériences qui permettront d'étendre la température et la pression, et de reproduire plus précisément la quantité d'impuretés (nickel, silicium, oxygène, etc.) présentes dans le noyau pour approfondir l'interprétation des mesures de sismologie.

Il est extrêmement difficile de fabriquer de l' ϵ -Fe en laboratoire sous forme de monocristal. L'approche naïve – prendre un monocristal de la forme α -Fe du fer à pression ambiante et essayer de le comprimer en ϵ -Fe – ne fonctionne pas. Lors de la transformation α -Fe vers ϵ -Fe, le cristal se fragmente en une myriade de cristaux ϵ -Fe trop petits pour être étudiés. En outre, leurs réseaux cristallins sont déformés par la transformation, de sorte que les propriétés des cristaux formés diffèrent considérablement **2**. L'équipe a abordé le problème sous un angle différent, en s'intéressant à une autre forme du fer. Outre l' α -Fe et l' ϵ -Fe, il existe également la forme γ -Fe que le fer adopte à haute température, comme le montre la **figure 2**. Les domaines de pression et de température où on peut observer chacune de ces trois phases se rejoignent en un point triple, le point A sur la

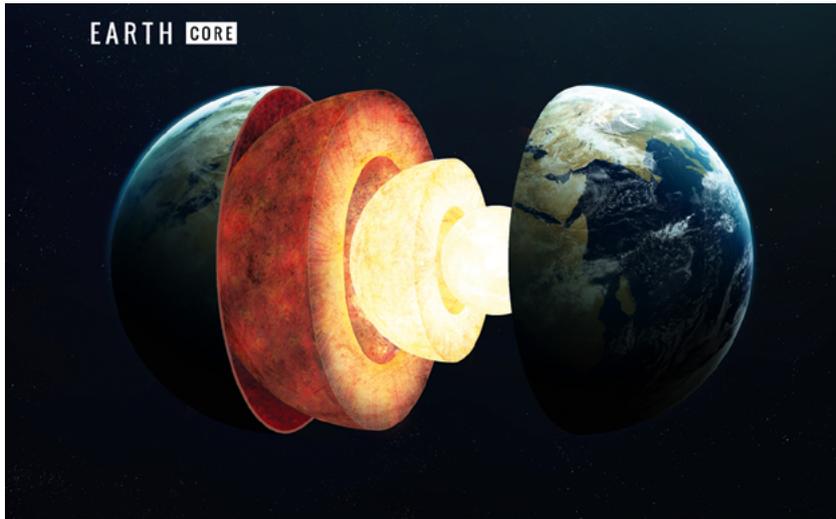


figure 1

Vue d'artiste montrant l'intérieur de la Terre. De la surface vers le centre, on rencontre la croûte terrestre, puis le manteau, le noyau externe, liquide, et enfin le noyau interne, solide, appelé graine, de rayon égal à un cinquième du rayon terrestre.

figure 2, de sorte que chacune peut se transformer en l'une ou l'autre suivant les conditions. En suivant la transition α - γ par diffraction de rayons X, l'équipe a remarqué que le γ -Fe formé avait une bonne qualité cristalline. En chauffant d'abord l' α -Fe en γ -Fe, puis en le comprimant en ϵ -Fe, elle a pu éviter la plupart des dommages qui surviennent lors de la transformation α - ϵ .

Les plus « grands » monocristaux d' ϵ -Fe synthétisés de cette manière (flèches rouges sur la figure 2) ne mesurent que 20 μm de diamètre: ils sont plus petits qu'un grain de sable. Cela pourrait sembler insuffisant pour

mesurer la réponse élastique d'un cristal. Mais grâce aux techniques de pointe utilisant les rayons X, c'est possible. L'équipe a donc sauté sur l'occasion et des mesures dites de diffusion de rayons X ont eu lieu au Centre européen de rayonnement synchrotron (ESRF, pour European Synchrotron Radiation Facility) à Grenoble. Les premiers résultats donnent les différentes vitesses auxquelles les ondes sismiques se propagent dans un cristal de ϵ -Fe en fonction de leur direction. Ils révèlent une tendance claire à l'anisotropie avec des différences entre les vitesses atteignant 15% pour différentes directions

de propagation. Cette anisotropie à l'échelle du cristal pourrait expliquer celle observée à grande échelle dans la graine. Ces résultats ont permis de valider des modèles théoriques quantiques décrivant le fer. Ils peuvent ensuite être extrapolés pour des conditions qui ne sont pas accessibles à l'expérience. À partir de là, les chercheurs espèrent en apprendre davantage sur l'histoire géologique des profondeurs de notre planète.

Enfin, ils se demandent aussi quels autres monocristaux pourraient être synthétisés grâce à une attention particulière portée aux mécanismes de transformation de phase. On peut espérer que pour de nombreux systèmes métalliques les transformations solide-solide à haute pression pourront produire des microstructures aux propriétés exceptionnelles. On pourrait appeler cela la métallurgie des extrêmes.

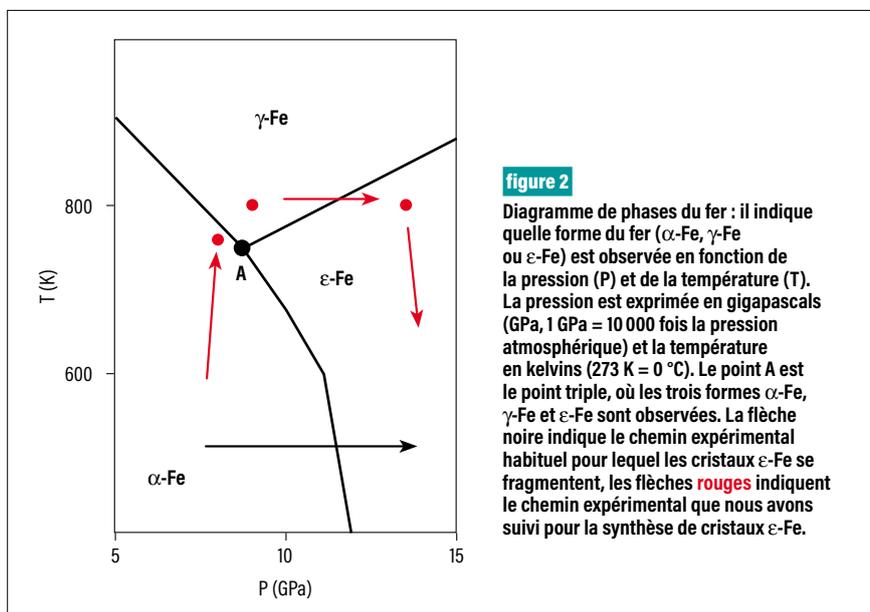


figure 2

Diagramme de phases du fer : il indique quelle forme du fer (α -Fe, γ -Fe ou ϵ -Fe) est observée en fonction de la pression (P) et de la température (T). La pression est exprimée en gigapascals (GPa, 1 GPa = 10 000 fois la pression atmosphérique) et la température en kelvins (273 K = 0 °C). Le point A est le point triple, où les trois formes α -Fe, γ -Fe et ϵ -Fe sont observées. La flèche noire indique le chemin expérimental habituel pour lequel les cristaux ϵ -Fe se fragmentent, les flèches rouges indiquent le chemin expérimental que nous avons suivi pour la synthèse de cristaux ϵ -Fe.

RÉFÉRENCES

- 1 A. Dewaele, B. Amadon, A. Bosak, V. Svitlyk, F. Occelli, « Synthesis of single crystals of ϵ -iron and direct measurements of its elastic constants », *Phys. Rev. Lett.*, **131**, 034101 (2023).
- 2 R. Fréville, A. Dewaele, N. Bruzy, V. Svitlyk, G. Garbarino, « Comparison between mechanisms and microstructures of α - ϵ , α - γ , γ - α phase transitions in iron », *Phys. Rev. B*, **107**, 104105 (2023).

B. Evin, D. Gaboriau, S. Challet, A. Fabre, S. Thiébaud [CEA – DAM, centre de Valduc]
V. Paul-Boncour, E. Leroy [Institut de chimie et des matériaux Paris-Est (ICMPE), UMR 7182
 CNRS – Université Paris-Est, Thiais]
M. Moskura, T. Charpentier [Laboratoire de structure et dynamique par résonance
 magnétique, UMR 3685 CEA – CNRS, Saclay]

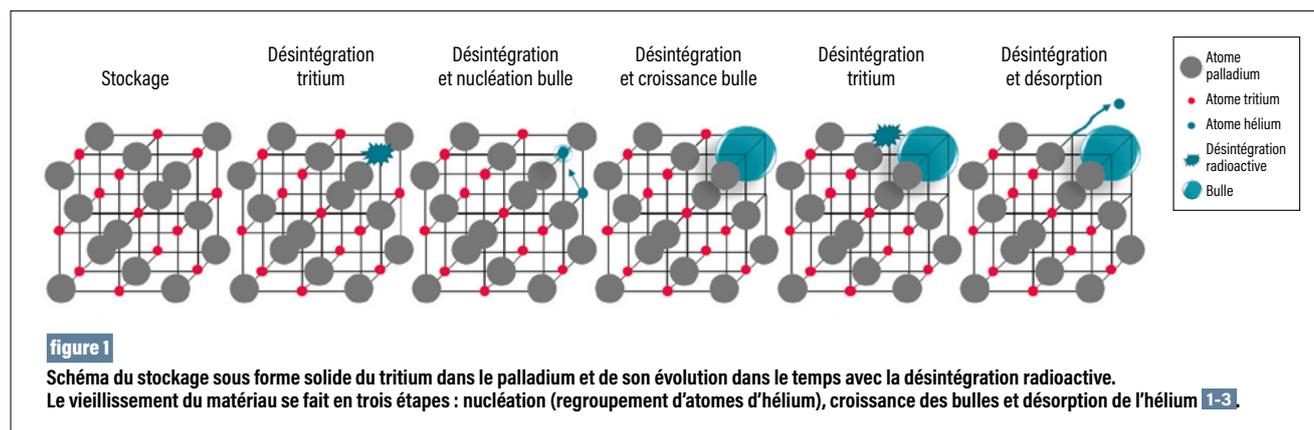
Du palladium qui vieillit, c'est du tritium qui bulle

Le stockage solide de l'hydrogène dans les métaux comme le palladium ne date pas d'hier puisqu'il remonte au XIX^e siècle. Au CEA – DAM, c'est le stockage de l'hydrogène radioactif, autrement dit le tritium, qui retient l'attention pour des études sur la fusion nucléaire. En se désintégrant, le tritium produit de l'hélium 3 qui reste piégé dans le palladium et entraîne des modifications des propriétés du métal : c'est ce qu'on appelle le vieillissement. Une équipe menée par le CEA – DAM a analysé du palladium vieilli pendant plus de vingt ans et a précisé le mécanisme de vieillissement **1**.

L'hydrogène est un gaz, stocké la plupart du temps sous forte pression dans des bouteilles. Ce mode de stockage est néanmoins volumineux. Pour moins d'encombrement et plus de sûreté, il est préférable de le stocker en l'insérant dans un métal. Ce stockage, dit solide, à la fois compact et sûr, est possible car l'atome d'hydrogène parvient à s'insérer entre les atomes du métal. À la manière d'une éponge, le palladium absorbe et retient 900 fois son volume en hydrogène

(à pression atmosphérique). Pour de l'hydrogène radioactif ou tritium, le composé formé est appelé tritium de palladium. Il est au cœur des recherches de l'équipe formée par le CEA – DAM, l'Institut de chimie et des matériaux Paris-Est et le Laboratoire de structure et dynamique par résonance magnétique de Saclay.

Le stockage du tritium est particulier, car celui-ci se transforme progressivement en hélium 3. Contrairement au tritium, l'hélium n'est pas à l'aise dans le palladium : les atomes d'hélium ont tendance à se regrouper entre eux, c'est l'étape de nucléation (**figure 1**). Ils forment alors des nanobulles dans le matériau de stockage, c'est l'étape de croissance. Malgré leur petite taille, ces nanobulles ont un impact significatif sur les propriétés du palladium. Après plus de dix ans de stockage, le palladium est saturé de nanobulles, il ne peut plus retenir d'hélium, qui se met à fuir du matériau : c'est l'étape de désorption. La pression augmente alors fortement dans le dispositif de stockage. Afin de garantir la sécurité et l'efficacité du stockage, il est donc primordial de comprendre et prévoir l'évolution du tritium de palladium – et de ses bulles ! – avec le temps, c'est-à-dire son vieillissement.



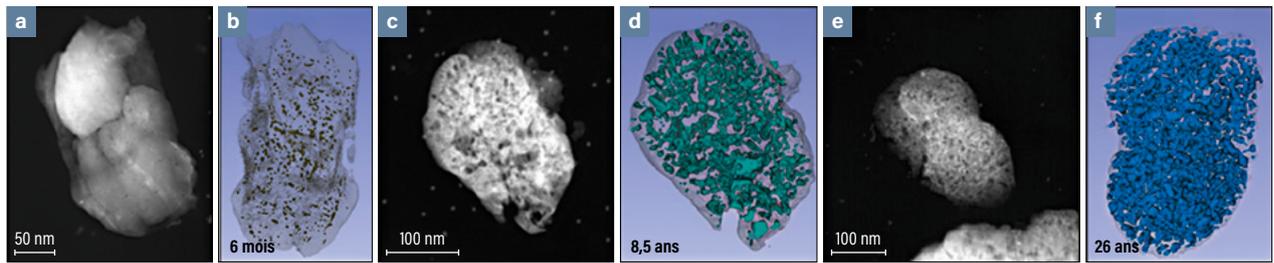


figure 2

a Image de microscopie électronique en transmission (MET) d'une poudre de palladium vieillie pendant six mois sous tritium. **b** Reconstruction du volume de l'échantillon par tomographie électronique à partir de 70 images similaires à l'image **a**. De la même façon, **c** est une image MET et **d** le volume de tomographie reconstruit pour un échantillon vieilli pendant 8,5 ans sous tritium. **e** et **f** sont l'image MET et le volume de tomographie reconstruit pour un échantillon vieilli pendant 26 ans sous tritium. La tomographie électronique permet d'identifier très clairement les nanobulles et de mesurer les distances qui les séparent.

L'étude du vieillissement de ce matériau sous tritium remonte à plusieurs décennies. Les trois étapes du vieillissement (nucléation, croissance, désorption) sont illustrées sur la **figure 1**. Les mécanismes de nucléation et de croissance des nanobulles sont étudiés depuis longtemps et sont maintenant assez bien établis **2,3**. La dernière étape, la désorption, est moins bien connue, car les échantillons ayant vieilli suffisamment longtemps pour l'atteindre sont peu nombreux.

Pour comprendre les mécanismes sous-jacents, notre équipe a d'une part mis au point une méthode de tomographie utilisant des images de microscopie électronique à transmission pour reconstruire le volume de l'échantillon vieilli sous tritium. Cette méthode a permis pour la première fois de mesurer les distances entre les nanobulles (**figure 2**). D'autre part, le CEA – DAM a développé un modèle de l'étape de nucléation **2**. L'accord obtenu entre les distances interbulles

mesurées et calculées est représenté sur la **figure 3**.

Ces nouveaux résultats expérimentaux viennent conforter la connaissance que nous avons des mécanismes mis en œuvre lors des deux premières étapes (nucléation, croissance). Enfin, l'analyse d'un matériau vieilli pendant plus de vingt ans sous tritium a permis d'émettre une première hypothèse et d'élaborer une modélisation de la désorption d'hélium : comme le métal ne semble pas fracturé sur l'imagerie, le mécanisme retenu envisage une saturation impliquant que tout atome d'hélium nouvellement créé est désorbé et non stocké **1**.

Ces travaux sont une illustration de la complémentarité des études expérimentales et théoriques : les mécanismes permettant au palladium de buller si longtemps sont maintenant mieux compris.

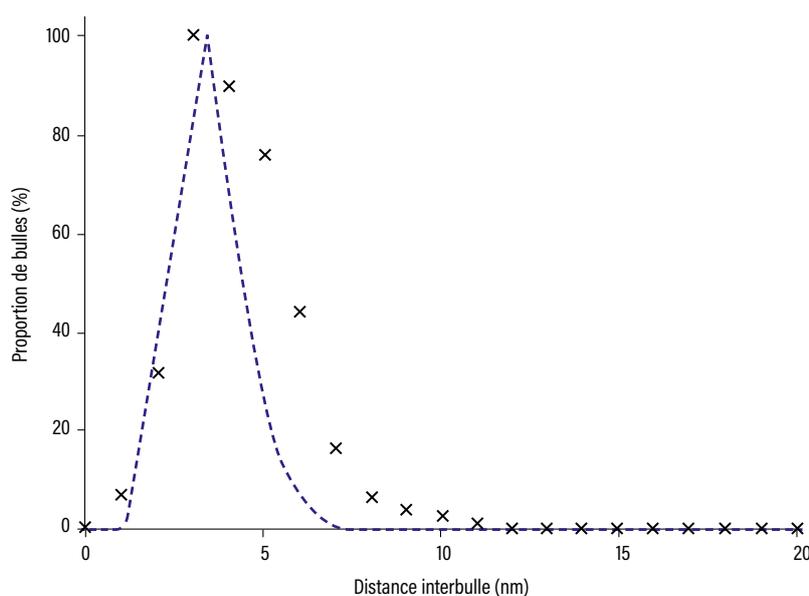


figure 3

Proportion de bulles séparées par une distance interbulle calculée avec le modèle (courbe pointillée en bleu) et mesurées par tomographie électronique pour du palladium vieilli pendant 6 mois sous tritium (croix) ; les mesures sont issues des analyses présentées sur la **figure 2**. L'accord entre les mesures et le calcul confirme la pertinence du mécanisme pris en compte dans ce modèle.

RÉFÉRENCES

- 1** B. Evin, M. Segard, É. Leroy, W. Baaziz, V. Paul-Boncour, S. Challet, A. Fabre, S. Thiébaud, M. Latroche, M. Moskura, T. Charpentier, « Aging of Pd under tritium: Influence of ^3He generation and associated mechanisms », *J. Alloys Compd.*, **938**, 168589, doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168589> (2023).
- 2** M. Segard, A. Fabre, S. Thiébaud, F. Montheillet, « Bubble nucleation process in a metal tritide modeled using a cellular automaton », *J. Nucl. Mater.*, **420**, n° 1, p. 388-395, doi: [10.1016/j.jnucmat.2011.10.014](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2011.10.014) (2012).
- 3** F. Montheillet, D. Delaplanche, A. Fabre, E. Munier, S. Thiébaud, « A mechanical analysis of metallic tritide aging by helium bubble growth », *Mater. Sci. Eng. A*, **494**, n° 1, p. 407-415, doi: [10.1016/j.msea.2008.04.033](https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.04.033) (2008).

B. Ravat, N. Favart, L. Jolly, B. Oudot, F. Delaunay [CEA – DAM, centre de Valduc]
D. Menut [Ligne Mars, synchrotron Soleil, Saint-Aubin]
I. Popa, S. Chevalier [Laboratoire interdisciplinaire Carnot de Bourgogne – UMR 6303 CNRS – Université de Bourgogne-Franche-Comté, Dijon]

Que devient le gallium lorsque l'alliage plutonium-gallium s'oxyde ?

Connaître le comportement physique et chimique du plutonium est indispensable pour maîtriser sa corrosion et ainsi pouvoir le stocker efficacement. Or, malgré des décennies de recherches, les mécanismes d'oxydation du plutonium et de ses alliages peuvent encore être affinés. En effet, des interrogations persistaient sur le comportement de l'élément d'alliage, le gallium. Des travaux du CEA – DAM permettent aujourd'hui de mieux appréhender son rôle dans le processus d'oxydation **1**.

Le plutonium est un métal fascinant. Il possède des propriétés très particulières qui en font un défi pour les physiciens et rendent son utilisation difficile en métallurgie : entre la température ambiante et la température de fusion, il passe par de nombreuses phases différentes, présentant des dilatations ou contractions importantes. Le volume peut en effet varier de 20 % ! Pour prévenir ces changements de phase problématiques, on utilise plutôt des alliages, en incorporant un autre élément au sein du plutonium comme le gallium. Par ailleurs, le plutonium, pur ou allié, est très réactif et très sensible à l'oxydation. Ainsi, la réactivité du plutonium est un sujet d'étude actif, car une atmosphère de stockage mal adaptée peut entraîner une corrosion sévère.

Des études précédentes avaient montré que l'oxydation de l'alliage plutonium-gallium consiste en l'épaississement d'une couche d'un oxyde de plutonium, Pu_2O_3 , suivie d'une croissance accélérée d'un autre oxyde de plutonium PuO_2 **2,3**. Mais que devient le gallium ? Reste-t-il au sein de l'alliage ou migre-t-il vers les couches d'oxyde ?

De récents travaux réalisés par une équipe américaine du Lawrence Livermore National Laboratory ont mis en évidence un enrichissement du gallium

dans l'oxyde de plutonium ainsi qu'un appauvrissement dans l'alliage sous-jacent **4**. Selon les auteurs, une partie du gallium migrerait vers la surface pour y former une couche d'oxyde de gallium, Ga_2O_3 . Ce phénomène se rapprocherait du processus de migration du chrome dans les aciers inoxydables, qui forme une couche compacte, adhérente et protectrice appelée chromine, Cr_2O_3 . L'analogie est tentante... mais peut-être erronée. En effet, des calculs théoriques suggèrent de leur côté que des atomes de gallium pourraient aussi prendre la place d'atomes de plutonium au sein de l'oxyde de plutonium. Oxyde de gallium ou gallium en substitution de plutonium : comment trancher ?

Afin d'élucider ce phénomène, nous avons mené une expérience de spectrométrie d'absorption des rayons X appelée Exafs sur la ligne de lumière Mars du synchrotron Soleil à Saint-Aubin, dans l'Essonne. Cette technique a été utilisée pour identifier la nature et la position des atomes entourant les atomes de gallium et savoir ainsi si ceux-ci étaient présents sous forme d'oxyde ou incorporés dans l'oxyde de plutonium. Pour cette étude, nous avons analysé la couche de PuO_2 présente sur un échantillon d'un alliage de plutonium contenant 1 % de gallium, et nous l'avons comparée à un composé standard de Ga_2O_3 . Mais nos résultats ont montré que cet oxyde de gallium ne s'était pas formé.

Est-ce que l'autre hypothèse, suggérée par les calculs théoriques, est exacte ? Autrement dit, le gallium se substitue-t-il en partie au plutonium dans le PuO_2 ? Pour le savoir, il aurait suffi de comparer un spectre Exafs de gallium substitué dans l'oxyde de plutonium au spectre Exafs que nous avons obtenu. Problème : aucun composé standard de cette nature n'existe. Nous avons donc calculé un spectre Exafs théorique de ce composé. Malheureusement, cette approche a mis en évidence un réel désaccord (**figure 1**) entre ce spectre théorique et celui mesuré.

Fallait-il aussi rejeter cette possibilité que le gallium vienne se substituer au plutonium ? Non, car il ne faut pas oublier les effets de déformation locale qui apparaissent lorsqu'un atome de gallium remplace un atome de plutonium : localement, les atomes présents peuvent se réorganiser, modifiant le spectre Exafs. Nous avons donc, dans notre analyse, modifié aléatoirement les positions de tous les éléments jusqu'à trouver la configuration des atomes permettant de restituer les spectres expérimentaux. En fin de compte, les résultats ont montré que le positionnement du gallium en substitution du plutonium permettait bien une restitution des données expérimentales moyennant un déplacement de celui-ci de 0,6 Å par rapport à sa position d'origine (figure 1).

Nous avons ainsi montré que, au cours du processus d'oxydation, les atomes de gallium migrent dans la couche d'oxyde PuO_2 . Ce phénomène tend à appauvrir en gallium l'alliage de plutonium et de gallium sous-jacent qui se transforme en une phase différente correspondant à celle du plutonium pur (figure 2).

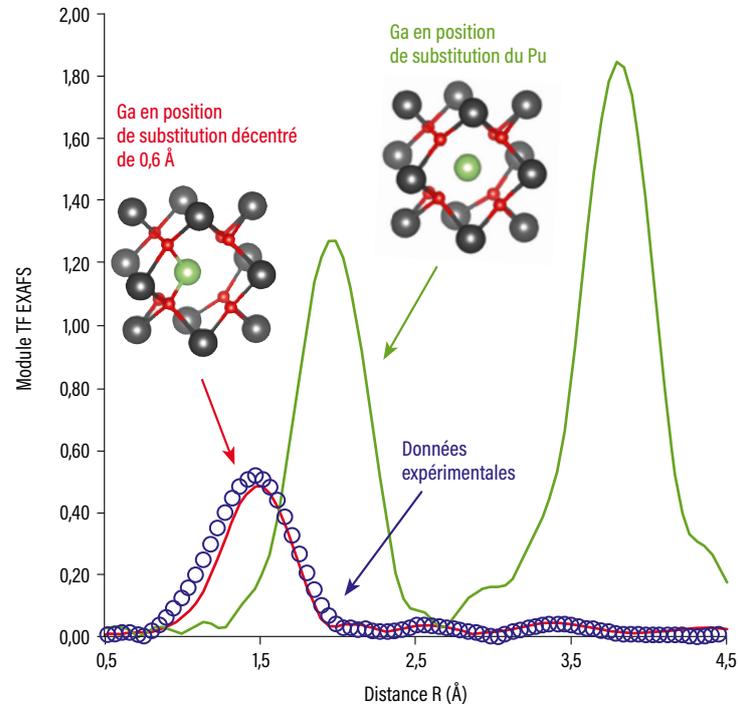


figure 1

Image de la position des atomes autour du gallium d'après les données des spectres Exafs expérimentaux (ronds creux en bleu) et théoriques considérant un positionnement du gallium (Ga) en substitution du plutonium (Pu, en vert). La courbe rouge est obtenue en modifiant dans les calculs la position du gallium au sein de l'oxyde de plutonium, et en accordant au mieux cette position avec les données expérimentales. Ce résultat montre que le Ga se positionne en substitution du Pu avec un déplacement de 0,6 Å, se rapprochant ainsi de quelques atomes d'oxygène.

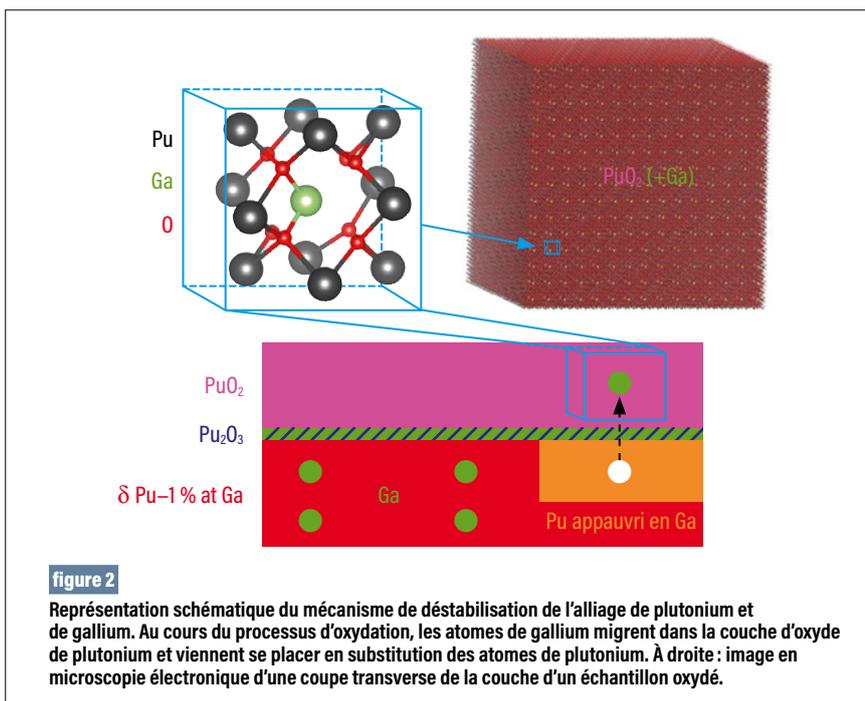


figure 2

Représentation schématique du mécanisme de déstabilisation de l'alliage de plutonium et de gallium. Au cours du processus d'oxydation, les atomes de gallium migrent dans la couche d'oxyde de plutonium et viennent se placer en substitution des atomes de plutonium. À droite : image en microscopie électronique d'une coupe transversale de la couche d'un échantillon oxydé.

RÉFÉRENCES

- 1 B. Ravat, N. Favart, L. Jolly, D. Menut, B. Oudot, F. Delaunay, I. Popa, S. Chevalier, « Oxidation of Pu alloys stabilized in δ -phase: Study of Ga alloying element behavior by using EXAFS analysis and reverse Monte Carlo simulation », *Corr. Sci.*, **218**, 111144 (2023).
- 2 B. Ravat, L. Jolly, B. Oudot, A. Fabas, H. Gueraut, I. Popa, F. Delaunay, « New insight into δ -Pu alloy oxidation kinetics highlighted by using *in-situ* X-ray diffraction coupled with an original Rietveld refinement method », *Corr. Sci.*, **138**, p. 66-74 (2018).
- 3 L. Jolly, N. Favart, B. Ravat, B. Oudot, I. Popa, S. Chevalier, « Une couche carbonée pour ralentir l'oxydation du plutonium », revue *Avancées*, **16**, p. 46-47 (2022).
- 4 S. Donald, J. Stanford, W. Talbot, C. Saw, B. Chung, W. McLean, « Evidence of an oxidation induced phase transformation for a delta phase plutonium-gallium alloy », *Corr. Sci.*, **194**, 109923 (2022).

C. Daoût, D. Rochais [CEA - DAM, centre du Ripault]
O. Rozenbaum, D. De Sousa Meneses [laboratoire Conditions extrêmes et matériaux :
haute température et irradiation (Cemhti), UPR 3079, campus CNRS d'Orléans]

Rentrée atmosphérique : à la recherche des meilleurs superisolants thermiques

Une équipe mixte du CEA - DAM et du CNRS a mis au point une méthode originale pour caractériser certaines propriétés thermiques des microconstituants de superisolants et ainsi prévoir le comportement thermique de ces derniers **1**. Ses travaux présentent un fort intérêt pour les programmes du CEA - DAM, puisque la connaissance de ces propriétés microscopiques permettra de sélectionner les microconstituants les plus pertinents pour l'élaboration des boucliers thermiques des futurs programmes.

Lorsqu'il pénètre dans l'atmosphère, un corps de rentrée est soumis à des températures extrêmes. Des matériaux superisolants, c'est-à-dire plus isolants que l'air, sont employés pour que son intégrité soit assurée tout au long de sa mission. Ces matériaux superisolants sont composés d'une multitude d'objets à l'échelle micrométrique (plus fin qu'un cheveu, voir **figure 1**). Cette organisation spatiale de la structure du matériau entraîne la présence de nombreux espaces vides, ce qui limite grandement la quantité de chaleur qui se propage dans la matière. Cependant, lorsque des températures élevées sont atteintes, le transfert de chaleur par rayonnement thermique devient prépondérant. Ce rayonnement est difficile à stopper, puisqu'il peut se propager dans la matière comme dans le vide et être plus ou moins absorbé en fonction de sa longueur d'onde. Les bonnes performances d'isolation d'un matériau dépendent alors des propriétés radiatives des microconstituants qui le composent et de leur agencement dans l'espace. Il est donc primordial d'identifier ces propriétés pour prévoir par la simulation numérique le comportement thermique des isolants et s'orienter vers l'élaboration d'un matériau optimal.

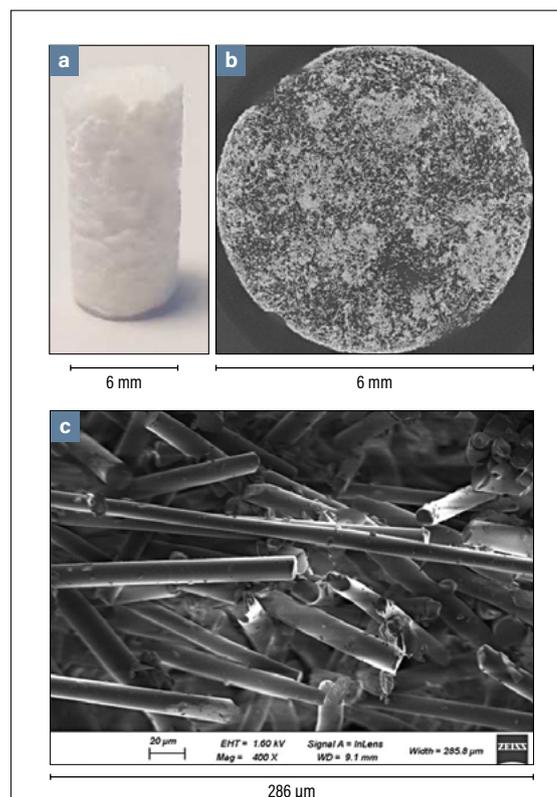


figure 1

a Photographie d'un échantillon de superisolant thermique de 6 mm de diamètre, composé de microfibrilles de silice. **b** Cliché de coupe transversale de l'échantillon obtenu par microtomographie à rayons X : les fibres sont les éléments les plus clairs, l'air correspond à la phase foncée. **c** Cliché de microfibrilles observées par microscopie électronique à balayage ; le diamètre des microfibrilles est de l'ordre de 10 µm. La connaissance des propriétés radiatives des microfibrilles permet de prévoir le comportement radiatif d'un échantillon de la taille de **a** ou supérieure

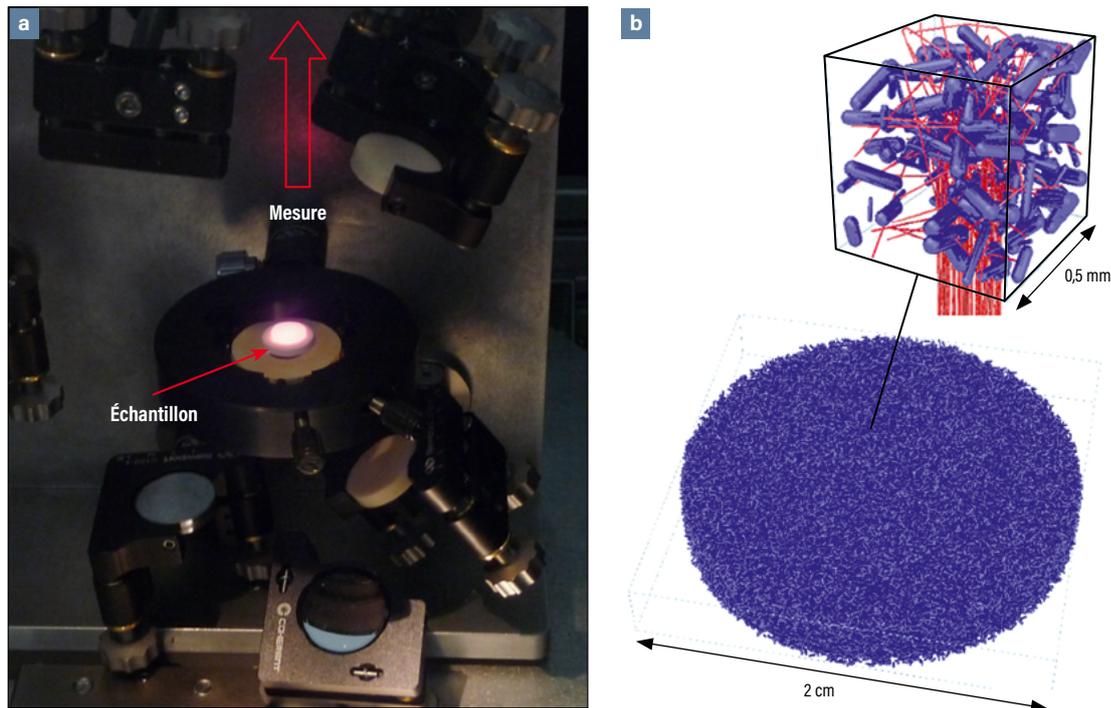


figure 2

a Photographie du dispositif expérimental : un échantillon est chauffé par laser CO₂, il émet alors un rayonnement qui est mesuré par un spectromètre infrarouge placé au-dessus. Lorsqu'il est suffisamment chaud, le matériau émet également du rayonnement dans le visible, ce qui lui donne cette couleur rouge orangé visible sur la photographie. **b** Le rayonnement émis par une copie numérique de l'échantillon est calculé en étudiant les interactions entre des rayons lumineux (en rouge) et les microfibrilles (en bleu). Le recalage du calcul par la mesure conduit à la détermination des propriétés radiatives des microconstituants.

Il est difficile de réaliser des mesures à l'échelle des microconstituants pour en extraire les propriétés radiatives, en particulier à des températures élevées. C'est pourquoi une méthode originale a été développée pour extraire ces propriétés en fonction de la température et de la longueur d'onde : elle associe des mesures radiatives à l'échelle macroscopique relativement simples à réaliser et des outils de simulation numérique. En effet, grâce aux dispositifs de spectroscopie infrarouge disponibles au CNRS (figure 2), il est possible de quantifier la part de rayonnement infrarouge qui est réfléchi, transmise ou émise par un matériau en fonction de la température et de la longueur d'onde. Ces quantités peuvent également être estimées numériquement grâce à un code dit de lancer de rayons. La propagation du rayonnement au sein d'une copie numérique de la microstructure du matériau est ainsi simulée à partir des valeurs des propriétés radiatives de ses microconstituants. L'objectif est alors simple : trouver les valeurs des propriétés radiatives

qui permettent de simuler le même comportement radiatif que celui observé expérimentalement avec les outils de spectroscopie infrarouge.

La méthode ainsi développée a été appliquée à un échantillon de céramique composée de microfibrilles de silice (figure 1), dont l'agencement a été caractérisé. Les propriétés radiatives de ces fibres ont été déterminées en fonction de la longueur d'onde jusqu'à 737 °C. Elles ont ensuite permis de simuler le comportement radiatif macroscopique de l'échantillon avec une très bonne précision, puisqu'un écart de moins de 2 % a été constaté avec la mesure radiative. Ces résultats ont permis de valider cette méthode originale de détermination des propriétés radiatives des microconstituants, qui rend désormais possible la prévision du comportement radiatif d'un superisolant.

Par la suite, l'application de cette méthode aux matériaux étudiés au CEA – DAM a permis de déterminer les propriétés radiatives de plusieurs types de microconstituants en fonction

de la longueur d'onde, et ce au-delà de 1 000 °C [2]. Les propriétés ainsi déterminées permettront d'étudier numériquement et à moindre coût le comportement thermique de différents agencements spatiaux ou de concentrations de microconstituants pour aider à l'élaboration d'un superisolant optimal pour les projets du CEA – DAM.

RÉFÉRENCES

1 C. Daoût, O. Rozenbaum, D. De Sousa Meneses, D. Rochais, « Identification of the spectral complex refractive index of pure silica micrometric fibers versus temperature », *Int. J. Heat Mass Transf.*, **204**, 123869, doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2023.123869 (2023).

2 C. Daoût, *Modélisation des propriétés radiatives spectrales de microstructures poreuses réfractaires*, thèse de doctorat de l'université d'Orléans soutenue le 2 mars 2023.

C. Guérin, A. Saintonge, Y. Le Petitcorps [Laboratoire des composites thermostructuraux (LCTS), UMR 5801 CNRS - CEA - Safran - Université de Bordeaux, Pessac]
A. Allemand, T. Piquero [CEA - DAM, centre du Ripault]
A. Maitre, R. Boulesteix [Institut de recherche sur les céramiques (Ircer), UMR 7315 CNRS - Université de Limoges, Limoges]

Un nouveau matériau de protection thermique transparent aux ondes

Une équipe composée de chercheurs du CEA - DAM, du Laboratoire des composites thermostructuraux et de l'Institut de recherche sur les céramiques a mis au point un matériau céramique résistant à haute température, dense, quasi pur et transparent aux ondes radioélectriques **1**. Ce résultat majeur ouvre la porte à l'élaboration de composites pour les matériaux de protection de systèmes radar embarqués.

Lors de la traversée de l'atmosphère à vitesse supersonique, les véhicules aérospatiaux, tels que la fusée *Ariane* ou les navettes spatiales, subissent des températures élevées et des chocs. Le système radar de ces véhicules en particulier doit être protégé. Mais pour que son émetteur-récepteur puisse fonctionner, la protection doit atténuer aussi peu que possible les

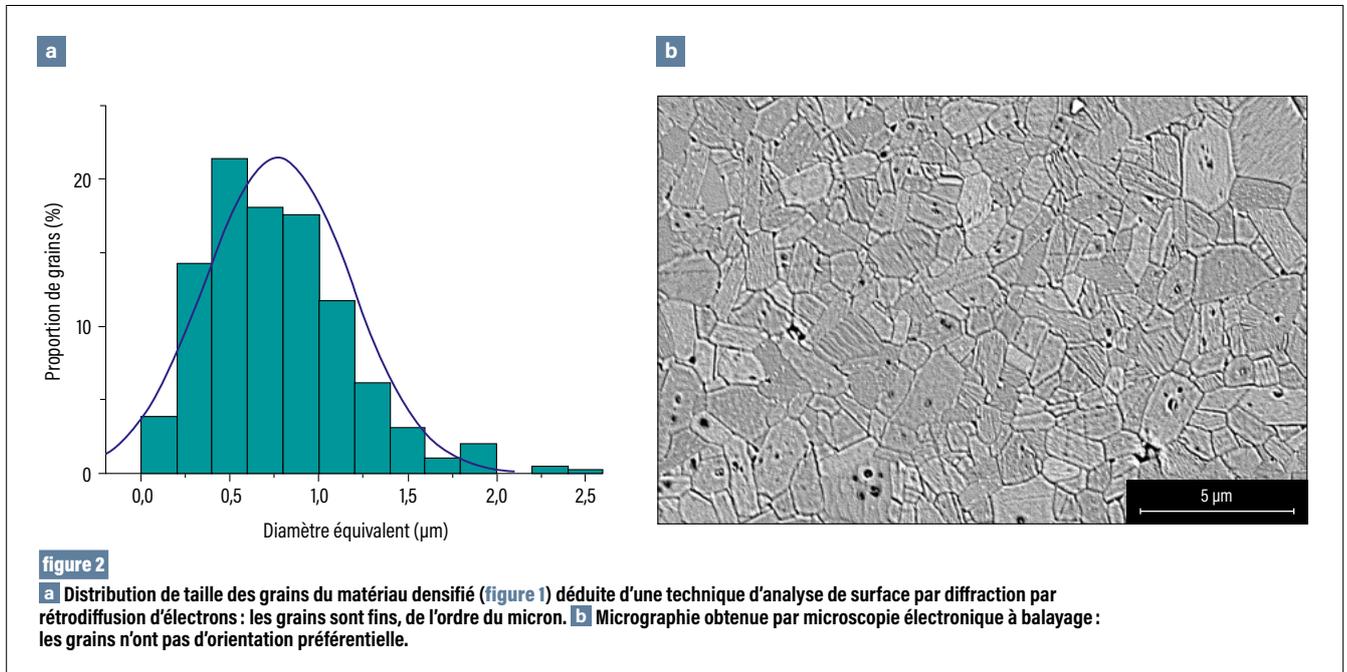
signaux émis et reçus, même dans des conditions extérieures extrêmes. Résistance aux températures élevées, transparence électromagnétique et résistance à la propagation des fissures sont les atouts recherchés pour les matériaux de cette protection **2**. Une équipe emmenée par des chercheurs du CEA - DAM a mis au point un matériau céramique répondant à ces contraintes.

En effet, les céramiques sont les matériaux appropriés pour les applications qui requièrent des températures supérieures à 1000 °C. Toutefois, leur fragilité constitue une limitation. Pour y remédier, les composites à matrice céramique renforcée par des fibres offrent une combinaison de propriétés alliant la légèreté et la résistance à la propagation des fissures, grâce aux renforts fibreux qui rendent le matériau moins fragile, tout en conservant la résistance à haute



figure 1

Le procédé de densification, appelé *Spark Plasma Sintering*, consiste à agglomérer des poudres sous l'effet simultané d'une forte impulsion électrique, d'une température élevée et d'une charge uniaxiale. Par rapport aux techniques traditionnelles, les vitesses de densification sont dix à cent fois plus élevées et la température de densification est relativement plus basse. Ces paramètres réduisent la croissance des grains et une microstructure fine du matériau densifié est obtenue (Source : ICMCB Bordeaux).



température de la matrice céramique. Dans la grande famille des composites à matrice céramique, les composites oxyde-oxyde sont plus résistants à l'oxydation. Parmi ceux-ci, les matrices de silice renforcées par des fibres de silice présentent de plus les meilleures propriétés de transparence aux ondes électromagnétiques. Pour cet usage spécifique, des composites à matrice oxyde à base de baryum, d'aluminium et de silicium, renforcée par des fibres d'alumine, tirent leur épingle du jeu.

Cet oxyde est approprié pour jouer le rôle de matrice, car il ne réagit pas avec les fibres d'alumine, il se dilate avec la température quasiment comme ces dernières, il est transparent aux ondes radioélectriques et il est réfractaire (il fond à 1750 °C). Le procédé de densification de poudre de cette céramique présente deux avantages appréciables (figure 1). Le premier est que les réactions par voie solide avec ce procédé permettent de fabriquer la céramique à partir des trois poudres composées de grains d'oxydes de baryum, d'aluminium et de silicium de taille micro-métrique et exemptes d'impuretés 1. L'enjeu majeur consiste à comprendre et à détailler les chemins réactionnels

et thermiques empruntés par le système au cours de la densification réactionnelle. C'est sur ce point qu'intervient le second avantage du procédé : ses vitesses de fabrication jusqu'à cent fois plus élevées que les autres procédés de densification permettent de minimiser les temps d'expérimentation. La gamme de température sur laquelle le système évolue se situe entre 600 et 1550 °C. Pour atteindre rapidement les températures de densification, on applique une vitesse de chauffe égale à 100 °C/min. L'étude expérimentale a montré qu'il est primordial de laisser le temps aux phases céramiques intermédiaires de se former et de réagir entre elles pour former, à une température égale à 1550 °C, la céramique dense et quasi pure 3. Le matériau obtenu n'a aucune porosité en surface, sa porosité en volume est inférieure à 5 % et les grains sont fins (autour du micron). De plus, les grains formés n'ont pas d'orientation préférentielle bien qu'une pression uniaxiale soit appliquée au cours de la densification (figure 2).

Ces résultats majeurs constituent le socle à partir duquel les chercheurs élaboreront des composites à matrice oxyde à base de baryum, d'aluminium

et de silicium renforcée par des tissus d'alumine. C'est un défi ambitieux pour permettre à ce composite oxyde-oxyde de se hisser dans la sphère restreinte des matériaux de protection à haute température transparents aux ondes électromagnétiques.

RÉFÉRENCES

- 1 C. Guérin, A. Saintonge, A. Allemand, A. Maitre, R. Boulesteix, T. Piquero, Y. Le Petitcorps, « Reactive spark plasma sintering of the hexacelsian barium aluminosilicate phase », *Journal of the European Ceramic Society*, **43**, p. 4985-4990, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2023.03.060> (2023).
- 2 A. Nag, R. Rao, P. K. Panda, « High temperature ceramic radomes (HTCR) - A review », *Ceramics International*, **47**, p. 20793-20806, doi: 10.1016/j.ceramint.2021.04.203 (2021).
- 3 C. Guérin, *Élaboration d'une matrice aluminosilicate de baryum pour la réalisation d'un composite de type oxyde/oxyde*, thèse de doctorat de l'université de Bordeaux soutenue le 30 mars 2022.

Formation des « coups de gouge » : le rôle de la turbulence éclairci

Une équipe du CEA - DAM en collaboration avec l'Onera s'est intéressée à des creusements macroscopiques réguliers qui apparaissent lors de l'ablation de la protection thermique d'un véhicule spatial en phase de rentrée atmosphérique. Elle a montré que la taille moyenne de ces creusements, appelés coups de gouge, est directement reliée aux grandeurs caractéristiques de la couche limite turbulente **1**, c'est-à-dire de la couche d'écoulement à la surface du véhicule où des interactions mécaniques et chimiques se produisent avec l'air.

Lors de sa rentrée dans l'atmosphère, la surface de la pointe avant d'un véhicule spatial est soumise à des pressions et des flux thermiques très intenses (parfois supérieurs à $10 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}$). Afin de garantir l'intégrité du véhicule dans de telles conditions, des solutions de protection thermique ont été développées. Pendant la phase de rentrée atmosphérique, le matériau de protection thermique subit les effets de l'oxydation et de la sublimation : c'est l'ablation. La dissipation d'énergie résultante retarde ainsi l'échauffement du véhicule. On observe alors l'apparition de creusements macroscopiques semblables à des coups de gouge, tels qu'illustrés sur la **figure 1**. Ces structures, liées à un couplage entre la paroi et la couche limite turbulente qui se développe à la surface du véhicule, provoquent une augmentation des transferts thermiques à la surface du corps de rentrée, ce qui tend à accélérer la dégradation de la protection thermique.

Il est intéressant de noter que des creusements similaires peuvent également apparaître dans une grande variété d'environnements géophysiques où une paroi est cisailée par un écoulement de fluide. Dans beaucoup de ces situations, l'écoulement est incompressible avec de faibles vitesses, et il existe

une corrélation proposée par Thomas **3** permettant de relier la taille longitudinale des motifs aux caractéristiques de la couche limite turbulente. Des travaux récents **4** ont montré que les dimensions des coups de gouge observés dans un contexte de rentrée atmosphérique se trouvent être en bon accord avec la corrélation de Thomas (voir **figure 2**). Une hypothèse importante formulée par celui-ci à partir de ses observations empiriques est que la taille longitudinale des coups de gouge est pilotée par les caractéristiques de la couche limite turbulente qui se développe au-dessus de la paroi.

La collaboration du CEA - DAM avec le centre Onera de Toulouse **1,4** a conduit à la réalisation de deux sortes de simulations : les premières par résolution directe des équations de Navier-Stokes sont précises mais coûteuses en temps de calcul ; les secondes, avec modèle de turbulence, sont moins coûteuses mais moins précises. Le rôle de la turbulence dans l'apparition de ces creusements a été mieux compris. En première approche, les coups

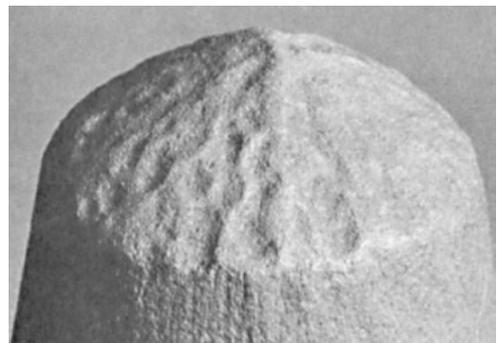
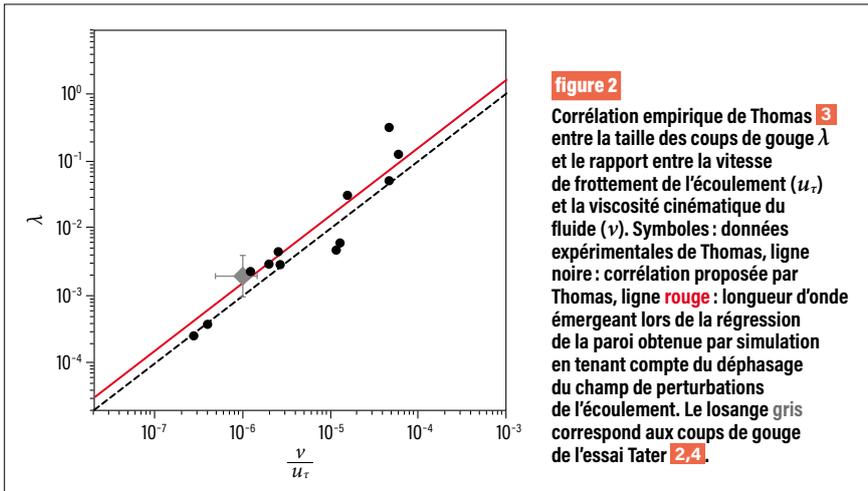


figure 1

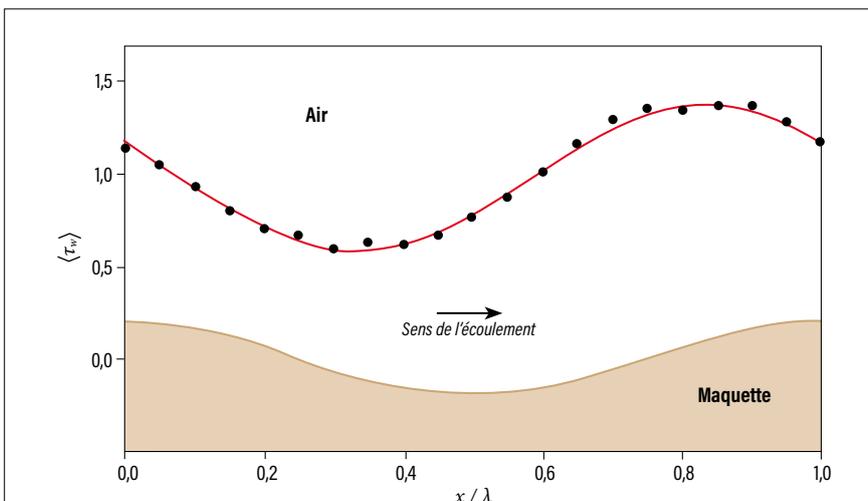
Coups de gouge observés sur la pointe avant de l'essai en vol Tater, réalisé dans les années 1970 par la National Nuclear Security Administration (NNSA) aux États-Unis **2**.



de gouge peuvent être vus comme une déformation sinusoïdale de la paroi. Dans les premiers instants de leur formation, cette déformation est de très faible amplitude. La réponse de l'écoulement dans cette configuration est linéaire, c'est-à-dire que les grandeurs de la couche limite peuvent être décrites par une fonction sinusoïdale de même longueur d'onde que la déformation de la paroi. En s'intéressant plus précisément au frottement de l'écoulement à la paroi, noté τ_w , on remarque l'apparition d'un déphasage des perturbations dues à la déformation de la paroi (voir **figure 3**). Les simulations directes et les simulations avec modèle

de turbulence ont été comparées à des résultats expérimentaux d'écoulements sur une maquette avec paroi ondulée issus de la littérature ⁵. Cela a permis de montrer que ce déphasage n'est pas correctement prédit par les modèles classiques de turbulence. En revanche, une modélisation plus complexe, dite au second ordre, procure de bien meilleurs résultats. Or, l'analyse des simulations directes met en avant que ce déphasage est responsable de l'émergence d'une longueur d'onde privilégiée lors de l'ablation de la paroi. Cette longueur d'onde peut être comparée favorablement à la corrélation de Thomas, comme cela est illustré sur la **figure 2**.

Ces travaux apportent une meilleure compréhension du rôle de la turbulence dans la formation des coups de gouge. Ils ouvrent la voie à une prise en compte plus précise de l'influence de ces structures dans le dimensionnement des protections thermiques. Pour aller plus loin, de nombreux phénomènes restent aujourd'hui à comprendre, tels que le caractère tridimensionnel de ces motifs ou l'augmentation réelle des flux de chaleur liée à ces structures.



RÉFÉRENCES

- ¹ F. Chedevergne, M. Stuck, M. Olazabal-Loumé, J. Couzi, « About the role of the Hanratty correction in the linear response of a turbulent flow bounded by a wavy wall », *Journal of Fluid Mechanics*, **967**, p. 281-283 <https://doi.org/10.1017/jfm.2023.507> (2023).
- ² G. Hochrein, G. Wright, « Analysis of the Tater nosetip boundary layer transition and ablation experiment », *14th Aerospace Sciences Meeting* (1976).
- ³ R. Thomas, « Size of scallops and ripples formed by flowing water », *Nature*, **277**, p. 281-283 (1979).
- ⁴ M. Stuck, *Ablation d'un matériau de protection thermique en régime turbulent*, thèse de doctorat de l'université de Toulouse soutenue le 12 décembre 2023.
- ⁵ J. Abrams, T. Hanratty, « Relaxation effects observed for turbulent flow over a wavy surface », *Journal of Fluid Mechanics* (1985).

N. Nourry-Martin, A. Denoeud, C. Chollet, M. Bonneau, S. Brygoo, S. Darbon

[CEA - DAM, centre DAM Île-de-France]

T. Vinci, A. Ravasio [Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (Luli), UMR 7605 CNRS - CEA - Sorbonne Université - École polytechnique, Palaiseau]

F. Balembois [Laboratoire Charles-Fabry, UMR 8501 CNRS - Université Paris-Saclay, Institut d'optique Graduate School]

On sait mesurer la température des plasmas

Pour conduire et interpréter correctement des expériences de fusion par laser, il est indispensable de mesurer la température des plasmas générés par les lasers ainsi que son évolution sur des temps très courts, de l'ordre de la nanoseconde. Une équipe tripartite du CEA - DAM, du Laboratoire Charles-Fabry et de l'École polytechnique vient de réaliser des mesures précises de température de plasma, avec une incertitude de 5 % contre 20 à 30 % auparavant 1. Son secret : avoir développé une source lumineuse spécifique.

Lors d'une expérience de fusion par confinement inertiel, comme au Laser Mégajoule (LMJ), les faisceaux laser, d'une puissance lumineuse de l'ordre de plusieurs milliers de gigawatts, sont focalisés sur un échantillon de matière de quelques millimètres cubes pendant quelques milliardièmes de seconde. Un plasma (gaz ionisé) se forme et s'échauffe à plusieurs dizaines, voire plusieurs centaines de milliers de degrés. Mais

combien exactement ? Il est difficile d'apporter une réponse précise. Jusqu'à présent, les mesures de température avaient des incertitudes importantes, de l'ordre de 20 à 30 %.

Mais les physiciens ont besoin de réponses plus précises pour améliorer leurs modèles. En effet, des modèles différents engendrent des valeurs différentes de température. Connaître plus exactement la température permettrait donc de sélectionner les modèles qui reproduisent le mieux les phénomènes en jeu.

Réaliser une mesure de température nécessite d'étalonner le « thermomètre ». On imagine bien qu'aucun objet ne résiste à plusieurs milliers de degrés. On mesure donc la température grâce aux émissions lumineuses du plasma. En effet, depuis la fin du XIX^e siècle, nous savons grâce au physicien Max Planck que chaque objet émet un rayonnement qui dépend de sa température : c'est le rayonnement dit du corps noir. En connaissant le nombre de photons émis et leur longueur d'onde, on en déduit la température. Mais comment connaître le nombre de photons émis ? Il faut dans un premier temps disposer d'une source lumineuse dont on connaît le

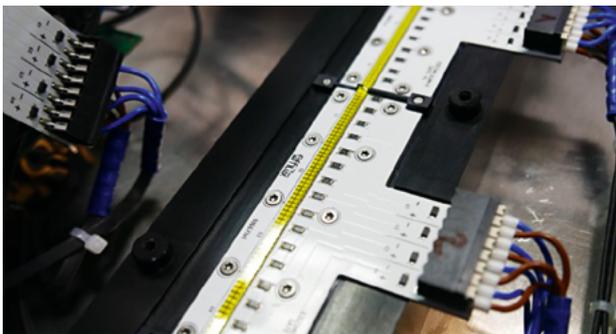
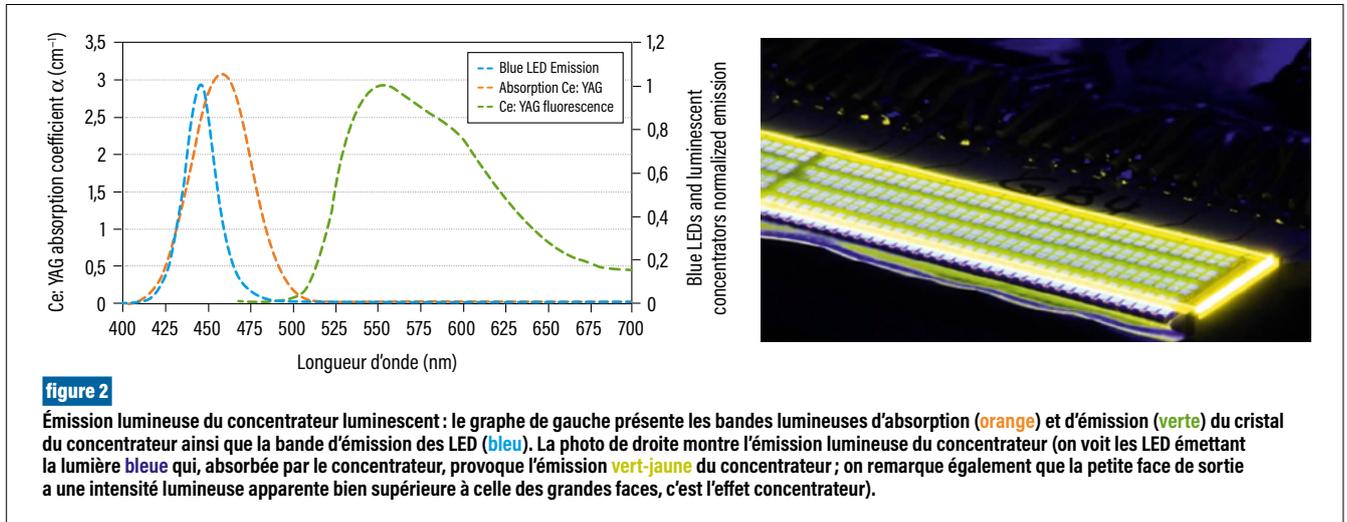


figure 1

Source à concentrateur luminescent : la photo de gauche présente le concentrateur luminescent (bande jaune) posé sur la matrice de LED ; la photo de droite montre la source intégrée avec la zone émissive au centre du carré noir.



nombre de photons émis pour étalonner notre mesure. C'est sur cet étalonnage que notre collaboration a fait une avancée décisive : nous avons développé une source lumineuse plus précise, plus stable et émettant davantage de photons que celles utilisées auparavant. Cette source et la méthode développées permettent, en première mondiale, de réaliser des mesures de température avec une incertitude de 5 %. Et nous montrons que ces mesures précises présentent des écarts substantiels avec des résultats plus anciens considérés comme référence **2**.

La source (**figure 1**) est basée sur un composant optique particulier : un concentrateur luminescent. C'est un composant optique de forme parallélépipédique de 20 centimètres de long qui émet de la lumière lorsqu'il est excité par des LED (acronyme anglais de diode électroluminescente) **3**. Il est taillé dans un cristal de grenat d'yttrium et d'aluminium dopé au cérium. Ce matériau absorbe la lumière dans le bleu proche de l'ultraviolet et la réémet dans le domaine vert-jaune (émission centrée autour de 550 nm). Deux matrices de LED émettant dans le bleu sont plaquées sur les grands côtés du concentrateur, permettant ainsi de provoquer la luminescence du cristal (**figure 2**). La forme du concentrateur permet d'obtenir une forte densité de puissance optique sur les petites faces de sortie. Nous avons obtenu une

puissance optique moyenne de 90 W sous forme d'impulsions temporelles d'une durée de 10 μ s avec un taux de répétition de 10 Hz. Ces impulsions se répètent avec des variations inférieures à 1 %. Les variations spatiales de l'émission lumineuse sur la surface de sortie sont inférieures à 0,7 %. Cette source est plus stable que les lasers, tout en restant suffisamment puissante.

Pour la première fois, une telle source a été utilisée lors d'une expérience de mesure de température d'un échantillon de quartz soumis à une pression dans l'installation laser Luli 2000 **4** de l'École polytechnique. Cela nous a permis de valider la méthode d'étalonnage à partir d'une température seuil de 4000 K. Les incertitudes de mesure ont été réduites dans une fourchette allant de 4 à 7 % en fonction des températures mesurées. Cette méthode, mise au point pour des mesures de température, peut aussi s'adapter à d'autres types de mesures, notamment celle évaluant la quantité de lumière qu'un faisceau laser transmet à une cible et la quantité de lumière diffusée par cette même cible. Elle pourrait ainsi devenir un outil standard dans l'arsenal des physiciens de la mesure lors d'expériences avec des plasmas. Nous envisageons de collaborer avec d'autres installations pour comparer les données et pour standardiser les méthodes d'étalonnage.

De plus, en utilisant d'autres cristaux dopés au cérium qui émettent de

la lumière à d'autres longueurs d'onde, nous pourrions couvrir une gamme de températures plus large et offrir un étalonnage à deux longueurs d'onde pour des mesures de température plus complexes. Comment améliorer encore la précision de nos mesures de température ? Une première piste est d'utiliser des caméras plus performantes pour améliorer le rapport signal à bruit. Une deuxième piste est liée à l'émissivité du plasma, qui caractérise sa capacité à absorber et à réémettre la lumière ; nous avons fait des mesures préliminaires et une thèse commencera sur ce sujet dans quelques mois.

RÉFÉRENCES

- 1** M. Nourry-Martin, A. Denoeud, C. Chollet, M. Bonneau, T. Vinci, A. Ravasio, S. Brygoo, S. Darbon, F. Balembos, « Absolute calibration of a streaked optical pyrometer at nanosecond time scale with a luminescent concentrator », *Review of Scientific Instruments*, **94**, 083502, <https://doi.org/10.1063/5.0145506> (2023).
- 2** D. Hicks *et al.*, « Dissociation of liquid silica at high pressures and temperatures », *Physical Review Letters*, **97**, 025502, doi: 10.1103/PhysRevLett.97.025502 (2006).
- 3** A. Barbet *et al.*, « Light-emitting diode pumped luminescent concentrators: a new opportunity for low-cost solid-state lasers », *Optica*, **3**, p. 465-468, <https://doi.org/10.1364/OPTICA.3.000465> (2016).
- 4** LULI2000 - Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (ip-paris.fr).

Y. Delvert, A. Chauloux, J.-C. Diot, T. Chanconie [CEA - DAM, centre de Gramat]
N. Ribière-Tharaud [CEA - DAM, centre DAM Île-de-France]
P. Lévêque [Institut Xlim, UMR 7252 CNRS - Université de Limoges, Limoges]

Sommes-nous vulnérables aux armes à énergie dirigée électromagnétique ?

Afin d'évaluer la vulnérabilité des systèmes électroniques critiques, une équipe du CEA - DAM a développé un nouveau moyen prototype pour générer des ondes électromagnétiques intenses dont la fréquence peut varier. Les ondes produites ont une puissance d'un demi-milliard de watts sur un temps extrêmement bref de 30 milliardièmes de seconde **1**.

Au moyen d'une antenne, le prototype rayonne ces impulsions 85 fois par seconde.

Les armes à énergie dirigée électromagnétique, fiction ou réalité ?

Les armes à énergie dirigée électromagnétique sont étudiées depuis de nombreuses décennies par les grandes puissances de ce monde. Il existe aujourd'hui une diversité de technologies matures génératrices d'ondes intenses, rendant ces concepts parfaitement crédibles. Par ailleurs, les conflits contemporains montrent un emploi croissant des systèmes électroniques. Ils permettent en effet de traiter des fonctions de plus en plus nombreuses et complexes. Cependant, ils sont vulnérables à l'arme à énergie dirigée électromagnétique qui peut les détruire ou les perturber à distance. À titre d'exemple, elles pourraient être une solution défensive efficace pour lutter contre la menace croissante des essaims de drones.

Une conception technologique contraignante

Le concept étudié comprend trois briques technologiques : un générateur à très haute tension impulsionnelle, un tube électronique hyperfréquence relativiste et une antenne. Le générateur employé fournit une puissance électrique faramineuse, comparable à celle produite par un réacteur nucléaire, mais pendant un temps des dizaines de millions de fois plus court qu'une seconde **2**.

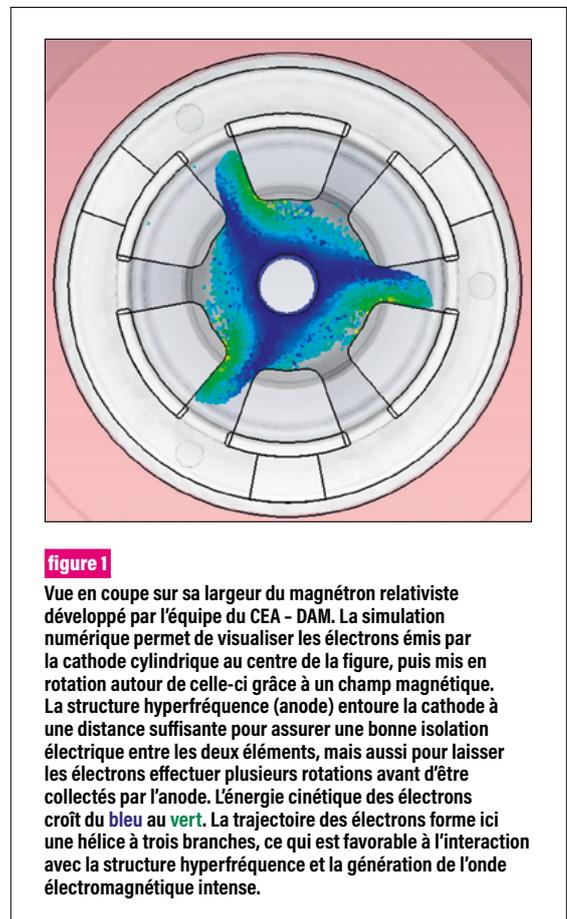


figure 1

Vue en coupe sur sa largeur du magnétron relativiste développé par l'équipe du CEA - DAM. La simulation numérique permet de visualiser les électrons émis par la cathode cylindrique au centre de la figure, puis mis en rotation autour de celle-ci grâce à un champ magnétique. La structure hyperfréquence (anode) entoure la cathode à une distance suffisante pour assurer une bonne isolation électrique entre les deux éléments, mais aussi pour laisser les électrons effectuer plusieurs rotations avant d'être collectés par l'anode. L'énergie cinétique des électrons croît du bleu au vert. La trajectoire des électrons forme ici une hélice à trois branches, ce qui est favorable à l'interaction avec la structure hyperfréquence et la génération de l'onde électromagnétique intense.

Cette énergie est injectée sous la forme d'une impulsion de très forte tension dans le tube électronique pour produire un faisceau d'électrons relativiste. Son interaction avec une structure hyperfréquence associée au tube convertit son énergie cinétique en une onde électromagnétique intense. L'antenne, ultime brique technologique de ce concept, rayonne ensuite l'onde en concentrant l'énergie dans une direction privilégiée.

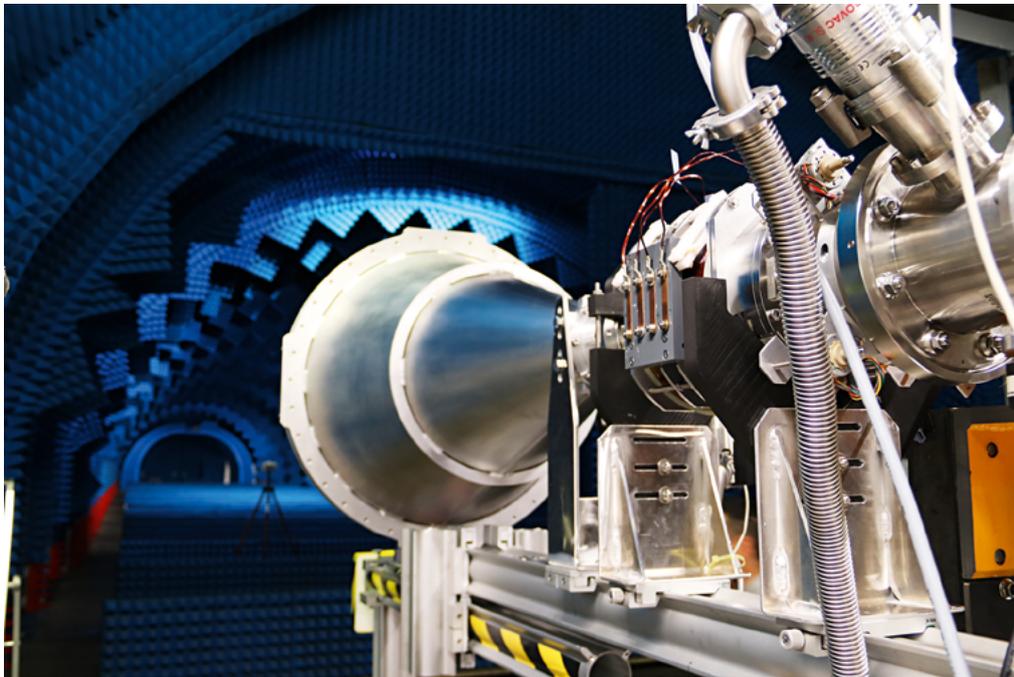


figure 2

Caractérisation du moyen prototype sur l'installation Mélusine, acronyme de Moyen Électromagnétique Utilisant des Signaux Non Entretenus, du centre CEA - DAM de Gramat, qui permet de simuler une propagation d'ondes électromagnétiques en espace libre sur près de 80 m de long.

Le processus de conversion de l'énergie du générateur en onde se fait classiquement avec un rendement énergétique de 10 à 20 % seulement. Ce rendement limité a l'inconvénient de réduire la portée de l'arme, et quand elle est transportée et alimentée par des batteries, de diminuer aussi son autonomie. De plus, l'arme doit non seulement avoir une portée suffisante, mais doit aussi être capable de générer une onde dans une large gamme de fréquences. Cette agilité en fréquence augmente en effet les probabilités de couplage, et donc les dommages sur les systèmes électroniques cibles. Mais, dans le même temps, elle dégrade le rendement.

Le prototype développé par l'équipe du CEA - DAM à Gramat repose sur la technologie du magnétron relativiste, meilleur compromis actuel entre rendement énergétique et agilité en fréquence. La structure proposée a été optimisée pour répondre à différentes contraintes grâce à des innovations structurelles majeures, ainsi que pour garantir une bonne tenue en tension et en puissance. L'équipe a simulé numériquement son

fonctionnement (figure 1) et estimé un rendement de 50 %. Mais cette estimation est une borne supérieure et l'expérience reste le juge de paix.

La caractérisation expérimentale, une étape déterminante

Du fait des tensions et courants extrêmement élevés, la mise en œuvre de ces sources à ondes intenses présente en pratique des difficultés importantes. C'est la raison pour laquelle les travaux de simulation numérique ne sont pas suffisants pour juger de la crédibilité des concepts modélisés. Le montage des trois briques technologiques précédentes a été réalisé au centre de Gramat, au sein de l'installation Mélusine (figure 2). En mai 2023, la source électromagnétique a oscillé avec succès, et un premier rendement en puissance de 35 % a été atteint le mois suivant, en plus d'une grande agilité en fréquence.

L'ensemble de cette étude est le fruit de trois années de doctorat 3. Le projet va se poursuivre, avec comme priorité l'optimisation du magnétron

afin d'augmenter la durée de l'impulsion électromagnétique produite. Ces travaux, fondés sur une compréhension fine de la physique en jeu, permettent à la France d'être acteur dans le domaine des armes à énergie dirigée électromagnétique et montrent sa capacité à innover.

RÉFÉRENCES

- 1 Y. Delvert, A. Chauloux, J.-C. Diot, T. Chanconie, N. Ribière-Tharaud, P. Lévêque, « Compact efficient and frequency tunable relativistic magnetron with reducing coaxial section and tilted tuners », *IEEE Transactions on Electron Devices*, **70**, n° 8, p. 4394-4400, doi: 10.1109/TED.2023.3282194 (2023).
- 2 F. Lassalle *et al.*, « Development and test of a 400-kV PFN Marx with compactness and rise time optimization », *IEEE Transactions on Plasma Science*, **46**, n° 10, p. 3313-3319, doi: 10.1109/TPS.2018.2837344 (2018).
- 3 Y. Delvert, *Contribution à l'étude de sources micro-ondes de forte puissance à efficacité optimisée et à fréquence variable*, thèse de doctorat de l'université de Limoges soutenue le 15 décembre 2023.

N. Bonod [Institut Fresnel, UMR 7249 CNRS – Aix-Marseille Université – Centrale Marseille, Marseille]
P. Brianceau [Laboratoire d'électronique et de technologie de l'information (Leti), CEA – DRT, Grenoble]
J. Daurios, S. Grosjean, N. Roquin, J.-F. Gleyze, L. Lamaignère, J. Neauport
 [CEA – DAM, centre du Cesta]

Laser Mégajoule : des motifs nanométriques pour plus de puissance

Une équipe rassemblant des chercheurs du CEA – DAM, du CEA – Leti et de l'Institut Fresnel vient de démontrer qu'il est possible de nanostructurer le verre de silice pour modifier l'état dit de polarisation d'un faisceau laser ultraviolet de haute énergie **1**. L'utilisation d'un tel composant optique sur un laser de puissance pourrait limiter son endommagement et ainsi permettre de repousser la puissance maximale de 30 % environ.

La recherche de la fusion nucléaire par laser est l'objet d'intenses efforts dans le monde. Plusieurs chaînes laser de haute énergie délivrant des impulsions laser de durée nanoseconde à la longueur d'onde de 351 nm visent à sa maîtrise, notamment aux États-Unis avec le National Ignition Facility et en France avec le Laser Mégajoule, situé au centre CEA – DAM du Cesta. Le premier a réalisé en décembre 2022 une première historique

avec une énergie produite par les réactions de fusion supérieure à l'énergie des faisceaux laser ayant permis de les déclencher. L'approche de fusion nucléaire par laser révèle au cours des années ses multiples intérêts, mais les défis à relever sont encore nombreux **2**.

L'énergie et la puissance maximales accessibles sur les installations laser de ce type sont notamment limitées par l'endommagement des composants optiques. Au passage du faisceau laser ultraviolet de forte puissance, le composant optique s'endommage en surface ou en volume. En particulier, la forte intensité des faisceaux peut conduire à la génération d'effet Kerr : cet effet peut entraîner une autofocalisation des faisceaux dans le verre et créer des dommages dans le volume sous la forme de multiples filaments (**figure 1**).

Pour contrer ce phénomène, des chercheurs du CEA – DAM, du CEA – Leti et de l'Institut Fresnel ont tiré profit d'une propriété de l'effet Kerr : cet effet dépend de la polarisation du faisceau laser, c'est-à-dire de l'orientation privilégiée d'oscillation de l'onde lumineuse. Il peut ainsi être réduit en basculant

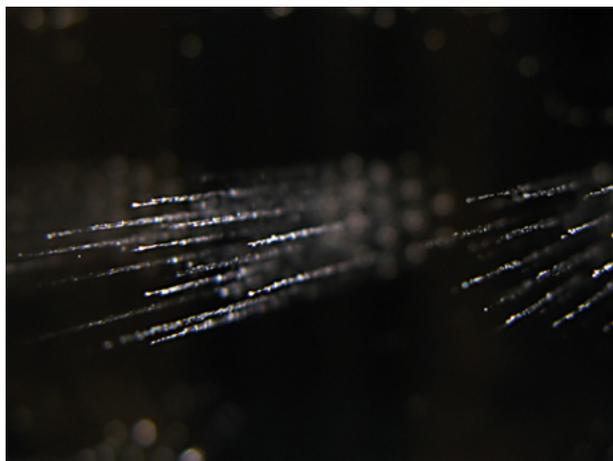
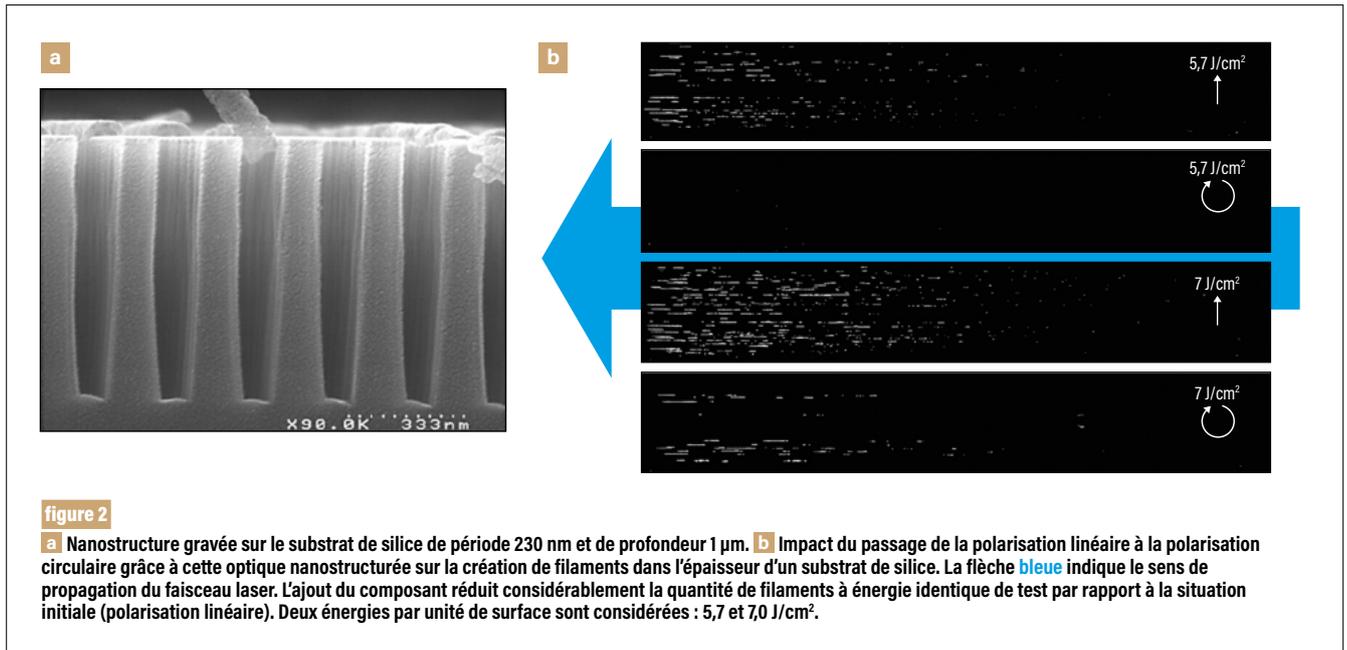


figure 1

Photographie de filaments créés dans l'épaisseur d'un hublot de silice soumis à une énergie et une puissance importantes à la longueur d'onde de 351 nm. L'effet Kerr autofocalise le faisceau lors de sa propagation dans l'épaisseur du hublot, créant des dommages sous forme de multiples bulles organisées en filaments.



les faisceaux d'une polarisation linéaire à une polarisation circulaire. Mais quel composant optique peut-il manipuler la polarisation de faisceaux laser si énergétiques ? Les matériaux anisotropes, comme le quartz (silice cristalline), classiquement utilisés pour convertir une polarisation linéaire en une polarisation circulaire ne peuvent être traversés par des faisceaux laser aussi énergétiques sans s'endommager. Le verre de silice (silice amorphe) est donc le matériau le plus indiqué pour ces faisceaux, mais il est de nature isotrope et n'a donc aucune influence sur la polarisation du faisceau en incidence normale...

L'idée suivie par l'équipe de recherche est la suivante : créer une anisotropie en structurant la silice amorphe avec des sillons périodiques linéaires profonds et très rapprochés. Plusieurs difficultés se présentent pour concevoir et réaliser ce composant optique si particulier. La distance entre deux sillons doit être inférieure à la longueur d'onde du laser qui est ici très courte pour ces faisceaux laser ultraviolets (351 nm).

Le rapport d'aspect, égal au rapport de la hauteur à la largeur des sillons, doit de plus être supérieur à 8 pour compenser le faible écart d'indice de réfraction entre la silice et l'air. Le composant optique nanostructuré doit transmettre près de 100 % de la lumière qui l'éclaire. Enfin, le procédé de fabrication doit garantir un grand état de propreté afin de permettre à l'optique de supporter les hautes intensités de ces chaînes laser.

L'équipe de recherche a montré dans une première étude **3** la possibilité de réaliser une telle structure périodique sur une surface de $5 \times 5 \text{ cm}^2$ pour en vérifier le concept. Dans un second temps, l'équipe a développé une version de cette optique nanostructurée sur une surface utile de $11 \times 11 \text{ cm}^2$. Cette dernière comporte une distance entre sillons encore plus courte (230 nm) et une profondeur de gravure atteignant $1 \mu\text{m}$ afin d'en améliorer la transmission et d'atteindre l'effet désiré sur la polarisation (figure 2a). Pour démontrer les bénéfices sur la diminution de l'effet Kerr, cette lame nanostructurée a été utilisée afin de réaliser des tests de filamentation en polarisation linéaire et en polarisation circulaire en éclairant un hublot de verre avec un faisceau laser de forte puissance polarisé linéairement. L'orientation de la lame nanostructurée par rapport à la polarisation linéaire incidente permet de conserver la polarisation linéaire ou de la basculer vers une polarisation circulaire. Les mesures ont montré qu'à une énergie par unité de surface de $5,7 \text{ J/cm}^2$, une polarisation circulaire ne génère aucun phénomène de filamentation pourtant bien présent en polarisation linéaire. À une énergie par unité de surface de $7,0 \text{ J/cm}^2$, la polarisation circulaire permet de réduire le taux de filamentation à un taux équivalent à celui observé à $5,7 \text{ J/cm}^2$ en polarisation linéaire (figure 2b) **1**.

Ces travaux montrent l'intérêt du contrôle de la polarisation pour

le développement de chaînes laser de haute énergie et de l'apport des surfaces de silice structurées à l'échelle nanométrique pour basculer de la polarisation linéaire à la polarisation circulaire. Outre le bénéfice d'un tel composant pour repousser le seuil d'apparition de l'effet Kerr, il pourra également être utilisé pour manipuler la polarisation à des fins de lissage optique et faciliter ainsi la réaction de fusion. L'enjeu réside dorénavant dans l'augmentation de la dimension de ces composants optiques pour atteindre une taille de l'ordre de celle des optiques du Laser Mégajoule, soit $40 \times 40 \text{ cm}^2$.

RÉFÉRENCES

- 1** N. Bonod, P. Brianceau, J. Daurios, S. Grosjean, N. Roquin, J.-F. Gleyze, L. Lemaître, J. Neupert, « Linear-to-circular polarization conversion with full-silica meta-optics to reduce nonlinear effects in high-energy lasers », *Nature Communications*, **14**(1), 5383 (2023).
- 2** B. Evangelista, « Ignition gives U.S 'unique opportunity' to lead world's IFE research », *NIF & Photon Science News*, <https://lasers.llnl.gov/news/ignition-gives-us-unique-opportunity-to-lead-worlds-ife-research> (2023).
- 3** N. Bonod, P. Brianceau, J. Neupert, « Full-silica metamaterial wave plate for high-intensity UV lasers », *Optica*, **8**(11), p. 1372-1379 (2021).

Des microséismes pour comprendre les failles sismiques

Des travaux sur les microséismes himalayens détectés avant un fort séisme, comme celui de Gorkha au Népal en 2015, révèlent la géométrie profonde des failles à l'origine du séisme **1**. Ce résultat suggère de documenter les distributions spatiales et temporelles des petits séismes pour mieux comprendre le comportement des grandes failles sismiques.

Le 25 avril 2015, un violent tremblement de terre (magnitude 7,8) a dévasté le centre du Népal, au pied de la chaîne de l'Himalaya. La rupture sismique a débuté en profondeur sur le chevauchement principal de l'Himalaya – la bordure de la plaque tectonique Inde. Elle s'est propagée vers l'est pendant 50 secondes, entraînant le glissement du compartiment supérieur de la faille vers le sud, un glissement de plusieurs mètres sur une zone de 140 km sur 50 km **2** (figure 1).

Cette rupture s'est produite à l'aplomb du réseau national sismologique népalais du Département des mines et de géologie du Népal, l'organisme chargé de l'alerte sismique nationale, maintenu dans le cadre d'une collaboration avec le CEA – DAM. Le tremblement de terre a gravement affecté la capitale, Katmandou. Il a fait des centaines de milliers de sans-abri et tué près de 10 000 personnes. Ce tremblement de terre a été suivi par plus de 50 000 répliques, dont des milliers ressenties dans la vallée de Katmandou peuplée de quatre millions de personnes. Les répliques – étudiées par des doctorants népalais et français dans le cadre de la collaboration – se sont développées autour de la région de la faille activée par la secousse principale (figure 1).

L'analyse de ce séisme permet de mieux comprendre ce qui se passe en profondeur. En effet, la géométrie des grandes failles à l'origine de ces séismes majeurs est souvent inaccessible à la plupart des techniques d'imagerie géophysique. La connaissance de ces zones progresse souvent lors des très forts séismes, heureusement très peu fréquents.

Avant tout, rappelons à quoi est dû un séisme. Lorsque deux plaques tectoniques convergent l'une vers l'autre, elles se déforment continuellement et de manière permanente en profondeur, là où les températures sont élevées, rendant les roches malléables. À plus faible profondeur, la faille est bloquée jusqu'à ce qu'une rupture se produise: c'est le séisme.

Les premiers travaux sur la rupture de 2015 au Népal ont montré que la faille a commencé à glisser à la base de la zone verrouillée, mais que ce glissement s'est interrompu brusquement à mi-chemin de la surface **2**. Cet arrêt de la rupture a été attribué à la présence d'une rampe, une structure en marche d'escalier de 2 à 3 km de haut révélée par les coupes géologiques les plus fines réalisées dans la région (figure 2). La rupture a donc été contrôlée par les changements de géométrie de la faille en profondeur.

D'autres marches d'escalier et complexités géométriques du plan de faille sont aussi présentes latéralement. À plus petite échelle, les variations de glissement sur le plan de faille coïncident aussi avec des particularités géométriques en profondeur. Ces zones particulières ont produit des bouffées d'énergie sismique pendant la rupture (figure 1).

L'étude des répliques (les séismes qui suivent le choc principal) permet de mieux cerner le comportement mécanique de la faille à la rupture. Parmi les observations les plus intrigantes, nous avons révélé

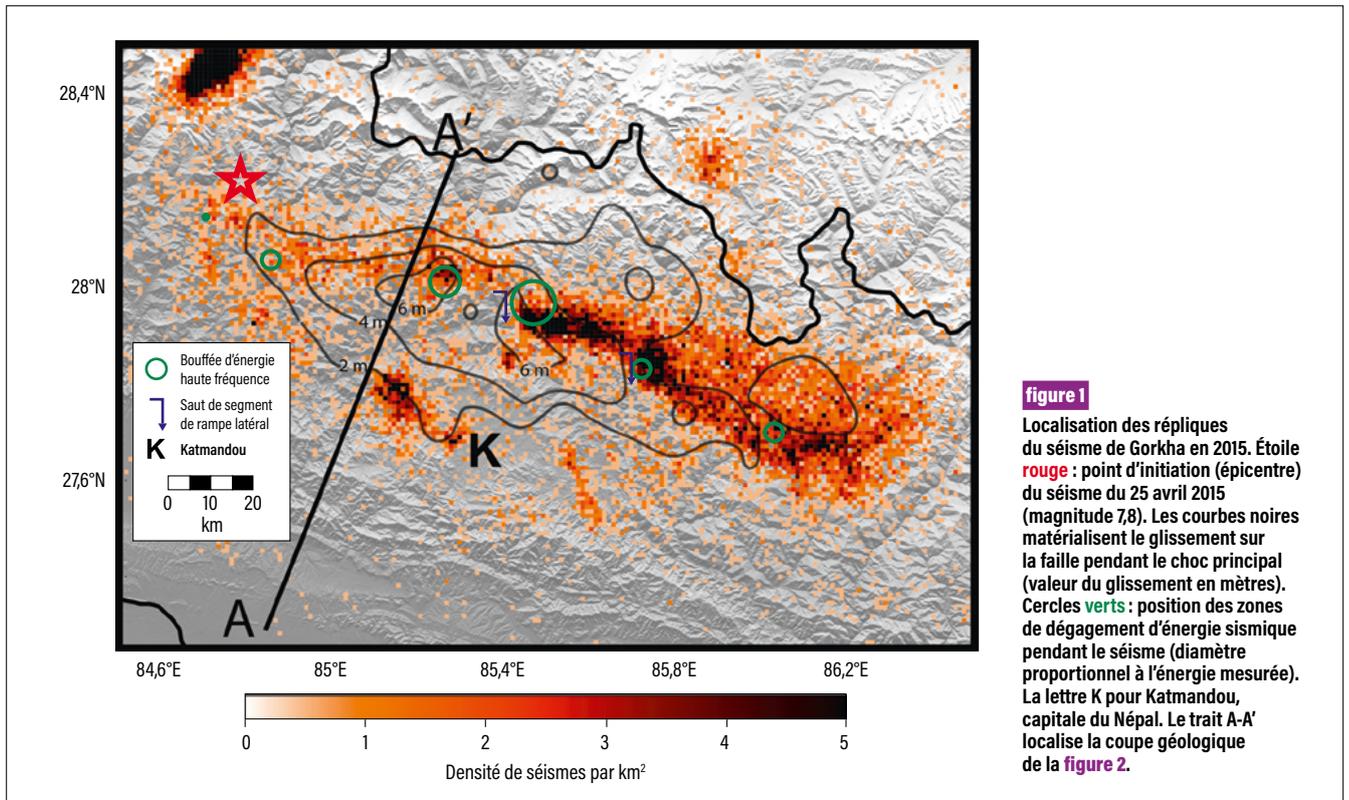


figure 1
Localisation des répliques du séisme de Gorkha en 2015. Étoile rouge : point d'initiation (épisode) du séisme du 25 avril 2015 (magnitude 7,8). Les courbes noires matérialisent le glissement sur la faille pendant le choc principal (valeur du glissement en mètres). Cercles verts : position des zones de dégagement d'énergie sismique pendant le séisme (diamètre proportionnel à l'énergie mesurée). La lettre K pour Katmandou, capitale du Népal. Le trait A-A' localise la coupe géologique de la figure 2.

que les variations de sismicité le long de la rupture avant, pendant et après le choc principal présentent des similarités. Elles sont localement contrôlées par la structure géologique profonde 1,3 ou par les hétérogénéités de friction le long du plan de faille. Cette observation suggère que la microsismicité dans les

années qui précèdent les forts séismes peut révéler à la fois l'extension des ruptures pendant le séisme et la relaxation des failles à la suite du séisme. Il y a tout lieu de penser que ce phénomène n'est pas spécifique au Népal et qu'il se réalise au moins le long d'autres grands systèmes géologiques similaires.

Il est donc crucial de bien documenter les variations latérales des petits séismes et des structures profondes le long des failles bloquées, pour anticiper les différents scénarios de rupture partielle ou totale des failles responsables des plus forts séismes et évaluer ainsi l'aléa sismique au plus juste.

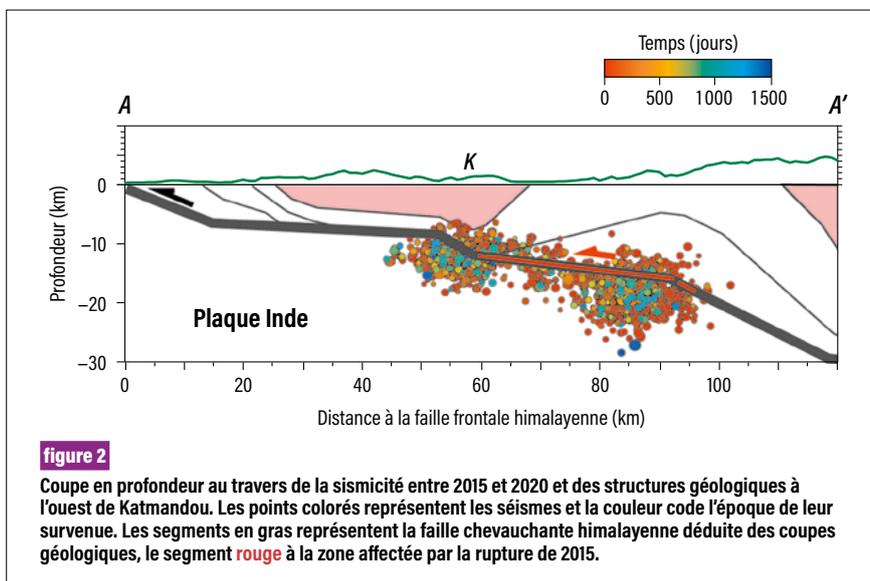


figure 2
Coupe en profondeur au travers de la sismicité entre 2015 et 2020 et des structures géologiques à l'ouest de Katmandou. Les points colorés représentent les séismes et la couleur code l'époque de leur survenue. Les segments en gras représentent la faille chevauchante himalayenne déduite des coupes géologiques, le segment rouge à la zone affectée par la rupture de 2015.

RÉFÉRENCES

1 L. B. Adhikari, M. Laporte, L. Bollinger et al., « Seismically active structures of the Main Himalayan Thrust revealed before, during and after the 2015 Mw 7.9 Gorkha earthquake in Nepal », *Geophysical Journal International*, **232** (1), p. 451-471, <https://doi.org/10.1093/gji/ggac281> (2023).
 2 R. Grandin, M. Vallée, C. Satriano, R. Lacassin, Y. Klinger, M. Simoes, L. Bollinger, « Rupture process of the Mw = 7.9 2015 Gorkha earthquake (Nepal): Insights into Himalayan megathrust segmentation », *Geophys. Res. Lett.*, **42**(20), p. 8373-8382 (2015).
 3 B. P. Koirala, M. Laporte, L. Bollinger et al., « Tectonic significance of the 2021 Lamjung (Nepal) midcrustal seismic cluster », *Earth, Planets and Space*, **75**, 165, DOI 10.1186/s40623-023-01888-3 (2023).

Quel matériau pour réduire l'impact environnemental de l'industrie métallurgique ?

Un pas important vers l'industrie décarbonée de demain a été franchi au CEA – DAM avec une solution permettant de limiter la production de dioxyde de carbone dans l'industrie métallurgique extractive, une des plus polluantes du monde **1**. Malgré les conditions extrêmes dans lesquelles se déroule le processus étudié, un des matériaux testés pourrait relever le défi.

Les métaux précieux et nobles (or, argent, platine, cuivre) sont présents dans la nature à l'état natif, c'est-à-dire à l'état métallique, par exemple sous forme de pépite. La plupart des métaux communs (fer, étain, zinc, aluminium...) ou moins communs, voire stratégiques (uranium, métaux de terres rares) sont contenus dans des minerais, c'est-à-dire des oxydes métalliques mélangés à

d'autres substances. Comment produit-on un métal à partir d'un tel minerai ? Différents traitements physico-chimiques, plus ou moins complexes, permettent d'obtenir un concentré d'oxydes métalliques purifié, dans lequel le métal d'intérêt reste lié à de l'oxygène.

Pour séparer le métal de l'oxygène, la majorité des procédés, comme les hauts-fourneaux actuels pour fabriquer de l'acier ou les cellules d'électrolyse pour fabriquer l'aluminium, utilise à haute température du carbone qui capte l'oxygène lié au métal et forme du dioxyde de carbone (CO₂). Compte tenu du changement climatique, il faut trouver des alternatives à notre manière de produire en développant des concepts moins émetteurs de CO₂. L'un d'eux **2** est particulièrement attractif, car il permet de fabriquer un métal en remplaçant les émissions de CO₂ par de la production d'oxygène (O₂). Le principe est décrit sur la **figure 1a** : en faisant circuler de l'électricité

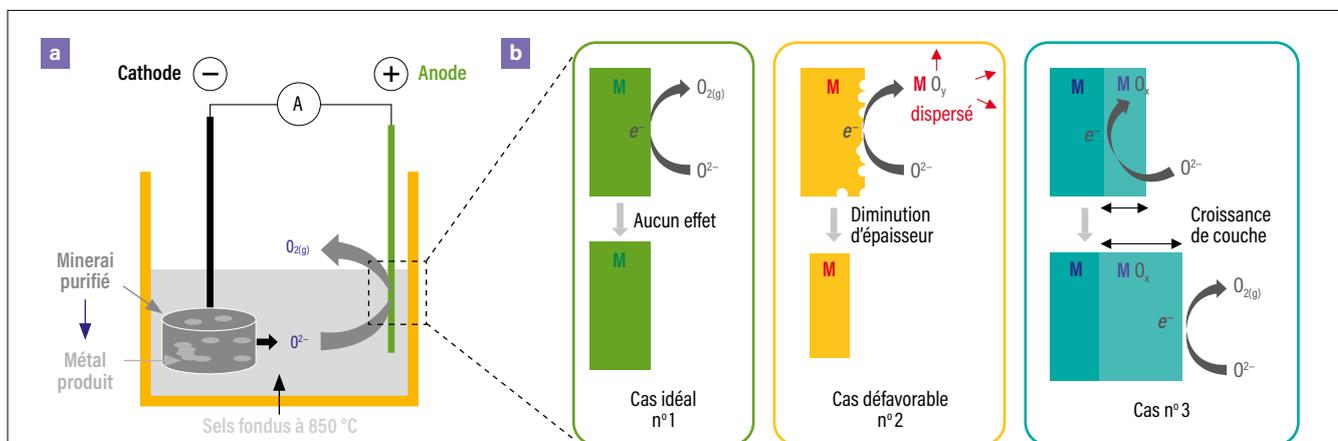


figure 1
a Principe du procédé étudié : un courant électrique est appliqué entre deux électrodes immergées dans les sels CaCl₂·CaO fondus à 850 °C. Au pôle négatif, le minerai purifié composant la cathode est réduit en métal. Cela libère de l'oxygène dissous sous forme d'ion O²⁻ qui est converti en O₂ sur une anode inerte (pôle positif). **b** Trois types de comportements sont possibles pour une anode. Dans le cas n°1, l'anode inerte constituée du métal précieux M transfère directement les électrons e⁻ depuis le métal vers les ions O²⁻ pour produire O₂. Cas n°2, l'anode « consommable » M réagit avec l'oxygène pour former une espèce gazeuse, liquide ou solide dispersé. Le cas n°3, l'entre-deux : le métal M forme une couche solide qui adhère à la surface, la protège et permet ensuite le dégagement d'O₂.

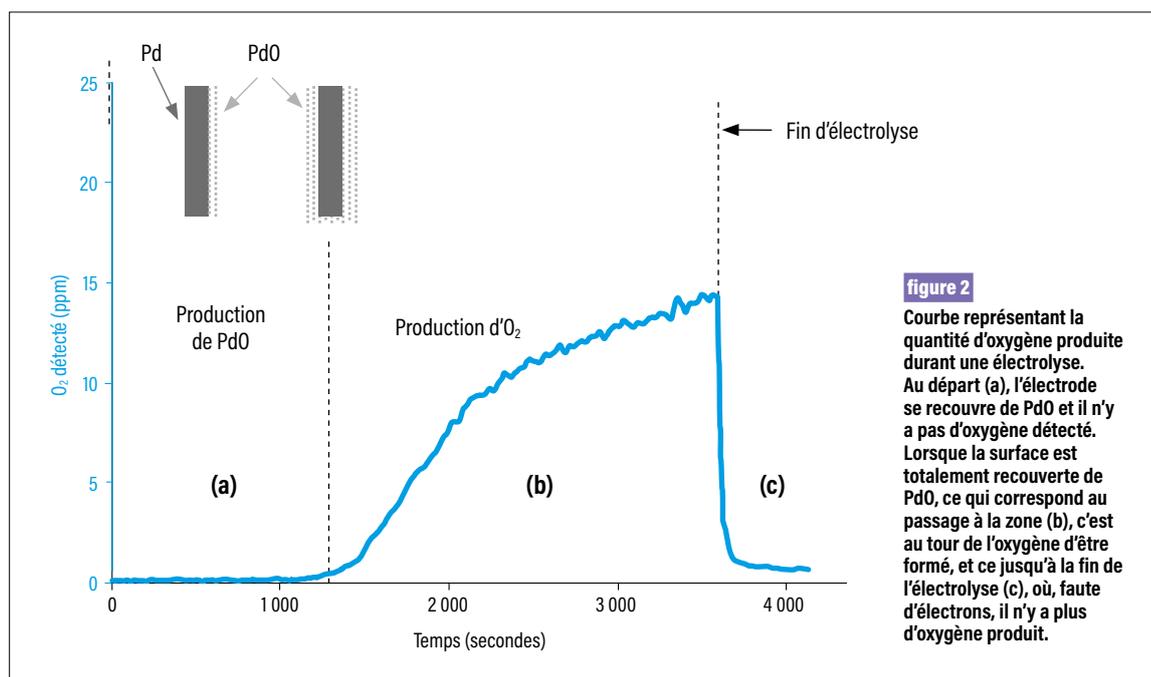


figure 2
 Courbe représentant la quantité d'oxygène produite durant une électrolyse. Au départ (a), l'électrode se recouvre de PdO et il n'y a pas d'oxygène détecté. Lorsque la surface est totalement recouverte de PdO, ce qui correspond au passage à la zone (b), c'est au tour de l'oxygène d'être formé, et ce jusqu'à la fin de l'électrolyse (c), où, faute d'électrons, il n'y a plus d'oxygène produit.

entre deux électrodes plongées dans un liquide particulier (sels fondus), du métal est formé à partir du minerai alors que de l'oxygène est dégagé.

Mais former de l'oxygène dans ces conditions (850 °C, sels fondus corrosifs) est un défi. Les travaux rapportés dans cet article s'intéressent aux métaux stratégiques. Une des problématiques sur lesquelles nous avons investi concerne la stabilité du matériau d'anode, l'électrode où l'oxygène est généré. La **figure 1b** montre trois cas lorsqu'un matériau polarisé, traversé par des électrons, est mis au contact d'oxygène dissous (ion O^{2-}) dans un milieu de sels fondus. Le cas n° 1 est le plus favorable, car le dégagement d'oxygène se fait directement sans altérer le matériau. Le cas n° 2 est celui le plus souvent rencontré : dans ce cas, la plupart des matériaux usuels sont consommés. Dans le cas n° 3, le matériau est peu altéré, une sorte de rouille se forme à la surface et le protège.

En cherchant à éviter le cas n° 2, nous avons étudié des métaux précieux comme matériau d'anode. Quoi de plus résistant que l'or, le platine et le palladium qui constituent nos bijoux et que l'on trouve à l'état natif dans la nature ? Ces trois métaux ont été classés selon deux critères **3** : d'une part, le matériau

résiste-t-il ou bien subit-il une modification de structure, une dégradation, rouille-t-il ? D'autre part, réussit-on à produire de l'oxygène (aspect souvent passé sous silence) et si oui, combien et avec quelle efficacité ?

La **figure 2** illustre les résultats obtenus pour du palladium (Pd) lors d'une électrolyse couplée à la détection d'oxygène. En début d'électrolyse dans la zone (a), une couche d'oxyde de palladium (PdO) est formée et il n'y a pas d'oxygène détecté. La zone (b) débute lorsque toute la surface de l'électrode a été transformée en couche protectrice PdO, sur laquelle de l'oxygène va pouvoir se former ! Il s'agit ici d'un mécanisme identique au cas n° 3.

Ces travaux ont montré que de l'oxygène peut être obtenu avec les trois métaux testés. Cependant, leur comportement est différent. L'or est consommé simultanément et indépendamment des conditions expérimentales. Le palladium subit finalement de fortes dégradations et il faudrait une maîtrise drastique des paramètres opératoires, non compatible avec l'exploitation du procédé, pour stabiliser la couche protectrice de PdO formée et conserver le matériau intègre (combinaison des cas n° 2 et 3). Finalement, c'est le platine qui, en se recouvrant d'une

couche protectrice d'oxyde de platine plus stable, offre le plus de garantie quant à son utilisation comme anode (cas n° 3).

Cette nouvelle méthode de production de métal, qui supprime les émissions de dioxyde de carbone, est prometteuse. C'est visiblement vers une couche protectrice d'oxyde métallique qu'il faut désormais s'orienter. L'oxyde de platine est un bon candidat, mais nous poursuivons nos travaux, notamment pour identifier un métal moins onéreux.

RÉFÉRENCES

- 1** J. Pertuiset, M. Gibilaro, O. Lemoine, P. Chamelot, G. Bourgès, L. Massot, « Electrochemical behavior of gold, palladium and platinum as inert anode materials for molten chloride electrolysis », *Electrochimica Acta*, **439**, 141598 (2023).
- 2** G. Z. Chen, D. J. Fray, T. W. Farthing, « Direct electrochemical reduction of titanium dioxide to titanium in molten calcium chloride », *Nature*, **407**, p. 361 (2000).
- 3** J. Pertuiset, *Étude de matériaux d'anode inerte pour la conversion d'oxyde métallique en métal par électrolyse en milieu chlorures fondus*, thèse de doctorat de l'université Paul-Sabatier Toulouse III soutenue le 3 avril 2022.

Une avancée décisive dans la chimie du plutonium en solution aqueuse

Une équipe du CEA – DAM vient de déterminer avec une précision de l'ordre du pour cent deux paramètres recherchés par la communauté internationale depuis près de 80 ans. Il s'agit des constantes d'hydrolyse du dioxyde de plutonium PuO_2^+ , correspondant aux rapports des concentrations à l'équilibre des espèces dans la solution aqueuse **1**. L'obtention de ce résultat est le point d'orgue d'études commencées il y a plus de vingt ans au CEA – DAM pour mieux connaître la dissémination de cette espèce chimique dans l'environnement. Dans ce domaine, l'équipe du CEA – DAM est devenue une référence.

Le cation PuO_2^+ est une espèce chimique étonnante. Étudiée dans les laboratoires, elle est instable. Dans l'environnement, en revanche, elle est majoritaire ; par exemple, 75 % du plutonium dissous dans les océans se trouve sous cette forme.

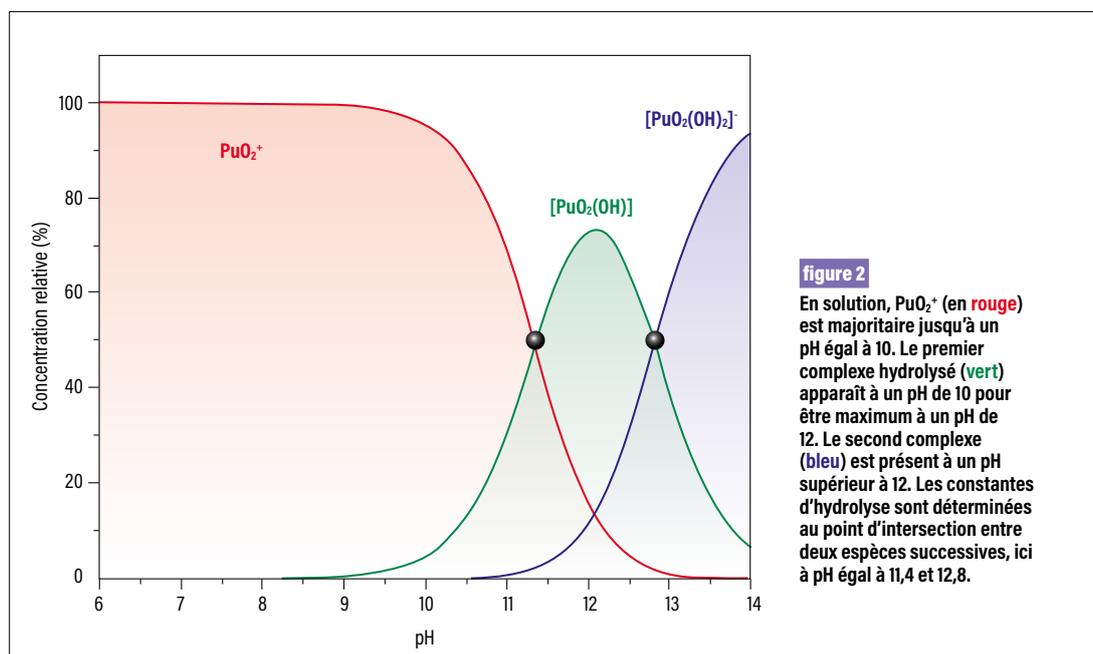
Pour prévoir le transport de ce cation dans les océans, il faut connaître sa chimie et en tout premier lieu les réactions de PuO_2^+ dans le milieu dans lequel il est dissous, l'eau. Mais pour mieux comprendre sa chimie, faisons un peu d'histoire.

Glenn Seaborg et ses collaborateurs découvrent le plutonium le 14 décembre 1940. Son nom est officialisé en 1942, et durant cette même année, environ 4 grammes de ce nouvel élément sont mis à la disposition de la communauté scientifique. Les chimistes s'attellent rapidement à en découvrir certaines propriétés fondamentales, comme ses différents degrés d'oxydation. Ceux-ci sont au nombre de quatre : il s'agit de Pu_3^+ , de Pu_4^+ qui est le plus stable d'entre eux, de PuO_2^+ – le plus instable – et enfin de PuO_2^{2+} . Puisque PuO_2^+ est majoritaire dans les océans, il faut s'intéresser aux constantes d'hydrolyse des réactions qui conduisent aux espèces $\text{PuO}_2(\text{OH})$ et $[\text{PuO}_2(\text{OH})_2]^-$. Les premières tentatives de détermination de ces constantes sont proposées en 1946,



figure 1

Flacon de 1,5 mL utilisé pour l'analyse. L'huile de paraffine, au-dessus de la solution, protège du dioxyde de carbone atmosphérique l'échantillon qui contient du plutonium très dilué. La protection dure de plusieurs jours à un pH égal à 10 à quelques heures, à un pH égal à 13.



mais aboutissent à ne publier qu'une limite supérieure en 1949 ² en raison de l'apparition d'une réaction chimique particulière, appelée dismutation, dans laquelle deux PuO_2^+ réagissent entre eux pour former deux autres espèces Pu_4^+ et PuO_2^{2+} . Cette réaction est tellement prépondérante pour ce cation qu'elle va limiter pour de très longues années la connaissance de sa chimie en solution. En 1992, une tentative infructueuse utilisant une technique plus sensible ³ bute également sur la dismutation. Depuis, aucune autre étude n'a été publiée.

Pourquoi les réactions d'hydrolyse sont-elles si importantes ? C'est la première réaction chimique entre un cation et l'eau. L'hydrolyse revient à casser une molécule d'eau en un anion OH^- et un proton H^+ , l'anion se liant ensuite avec le cation PuO_2^+ . Toutes les réactions chimiques en solution sont toujours en compétition avec l'hydrolyse, d'où la nécessité de bien connaître cette réaction afin de pouvoir d'une part modéliser correctement son transport dans l'environnement, en particulier marin, et d'autre part mieux maîtriser les processus industriels impliquant cet élément. Deux difficultés doivent être surmontées : la dismutation qu'il faut limiter, voire éliminer, et la présence de dioxyde de carbone dans l'atmosphère. La première a été

résolue il y a une vingtaine d'années en couplant une technique séparative et un spectromètre de masse. La seconde nécessite de comprendre l'interaction des carbonates avec PuO_2^+ .

Le CO_2 atmosphérique se dissout naturellement dans l'eau et sa concentration dépend du pH de la solution : plus cette dernière est basique, plus grande est la concentration en carbonate dissous. Or, l'interaction des anions carbonates pour PuO_2^+ est environ 1 000 fois plus forte que pour l'eau. En présence de carbonate, même en très faible concentration, la réaction d'hydrolyse sera totalement inhibée. Éviter la dissolution du CO_2 est possible en travaillant en boîte à gants, balayée par une atmosphère exempte de ce gaz. Cela nécessiterait cependant d'y inclure également la technique séparative et le spectromètre de masse. Le coût d'un tel dispositif est trop important. Nous avons opté pour une solution moins onéreuse et somme toute d'une certaine élégance. Au lieu de placer les appareils dans une boîte à gants pour les protéger de l'atmosphère, nous avons protégé l'échantillon lui-même en y ajoutant une huile minérale de densité inférieure à celle de l'eau afin que cette dernière se place au-dessus de la solution (figure 1). Cette protection n'est pas totale, car il est impossible d'empêcher la diffusion du CO_2 à travers l'huile. Cependant,

elle est efficace assez longtemps pour pouvoir réaliser les séparations sans interférence du CO_2 .

C'est ainsi que l'équipe du CEA – DAM a déterminé avec une précision de l'ordre du pour cent les constantes d'hydrolyse de PuO_2^+ (figure 2), valeurs attendues depuis exactement 77 ans ! Elles permettront d'appréhender la chimie du plutonium en milieu alcalin, par exemple dans les effluents historiques du site militaire américain de Hanford dans lesquels la forme majoritaire du plutonium est PuO_2^+ , mais également de prévoir la migration de ce cation dans les océans.

RÉFÉRENCES

- 1** J. Aupiais, C. Christin, M. Levier, « Aquatic chemistry of pentavalent plutonium: determination of the first hydrolysis constant », *Inorganic Chemistry*, <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.2c04398> (2023).
- 2** K. A. Kraus, J. R. Dam, « Hydrolytic behavior of plutonium(V) », the transuranic elements, IV-14B, Seaborg, Katz and Manning (éd.), McGrawHill, New York, p. 478-499 (1949).
- 3** D. A. Bennett, D. Hoffman, H. Nitsche, R. E. Russo, R. A. Torres, P. A. Baisden, J. E. Andrews, C. E. A. Palmer, R. J. Silva, « Hydrolysis and carbonate complexation of dioxoplutonium(V) », *Radiochimica Acta*, **56**, p. 15-19 (1992).

L'intelligence artificielle pour la conception de nouveaux explosifs

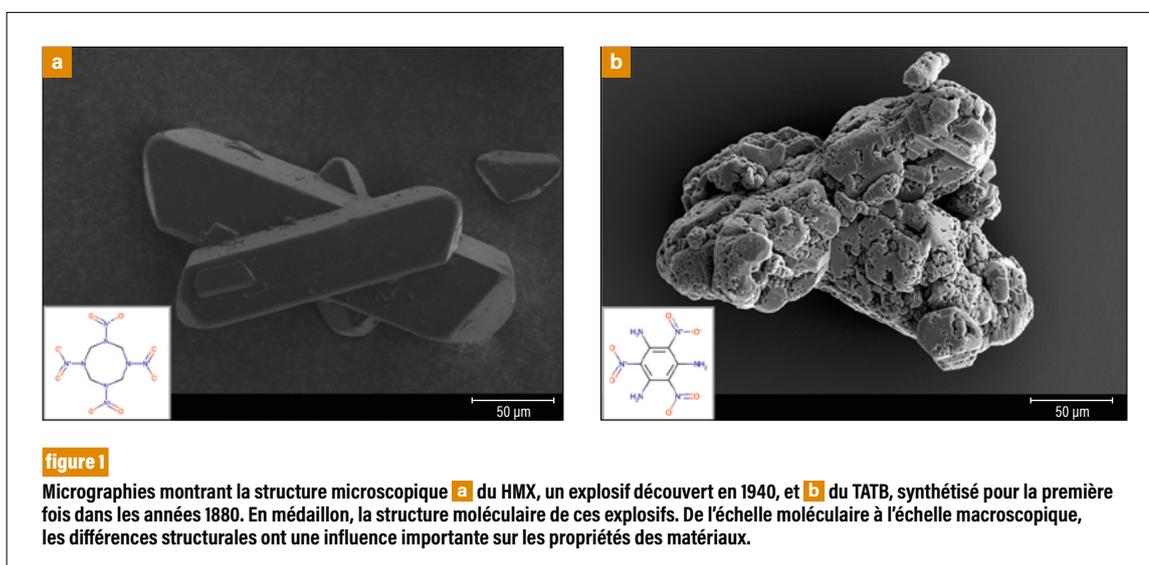
Une équipe du CEA – DAM cherche à savoir si un algorithme d'intelligence artificielle pourrait imaginer de nouveaux explosifs **1**. Ces algorithmes ont remporté des succès spectaculaires dans divers domaines, mais les exigences très spécifiques du CEA – DAM pour ces matériaux font chauffer les neurones artificiels.

Des véhicules autonomes à la création de contenu, les intelligences artificielles (IA) deviennent omniprésentes dans nos vies quotidiennes. Le constat est similaire dans le monde industriel. Dans l'industrie pharmaceutique par exemple, où il faut traditionnellement dix ans et un milliard d'euros pour développer un nouveau médicament, les attentes sont immenses **2**.

Qu'en est-il de l'industrie pyrotechnique? Faute de mieux, on utilise toujours une poignée de molécules découvertes au siècle dernier. Pour ses besoins propres et dans un contexte de menaces terroristes croissantes, il appartient au CEA – DAM de déterminer si l'IA peut faciliter la conception de nouvelles molécules explosives.

Le CEA – DAM n'a cependant pas attendu l'essor de l'IA pour étudier les propriétés des explosifs. Depuis une vingtaine d'années, des modèles mathématiques sont développés pour estimer leurs performances, c'est-à-dire la quantité d'énergie libérée lors d'une explosion. Aujourd'hui, nous sommes en mesure de prévoir cette énergie en connaissant seulement la structure en deux dimensions de ces molécules particulières, en médaillon dans la **figure 1**.

Molécules particulières? Pas vraiment. Ce qui est particulier, pour ne pas dire complètement contradictoire, c'est le comportement que l'on attend d'elles: stocker et libérer sur demande une grosse quantité



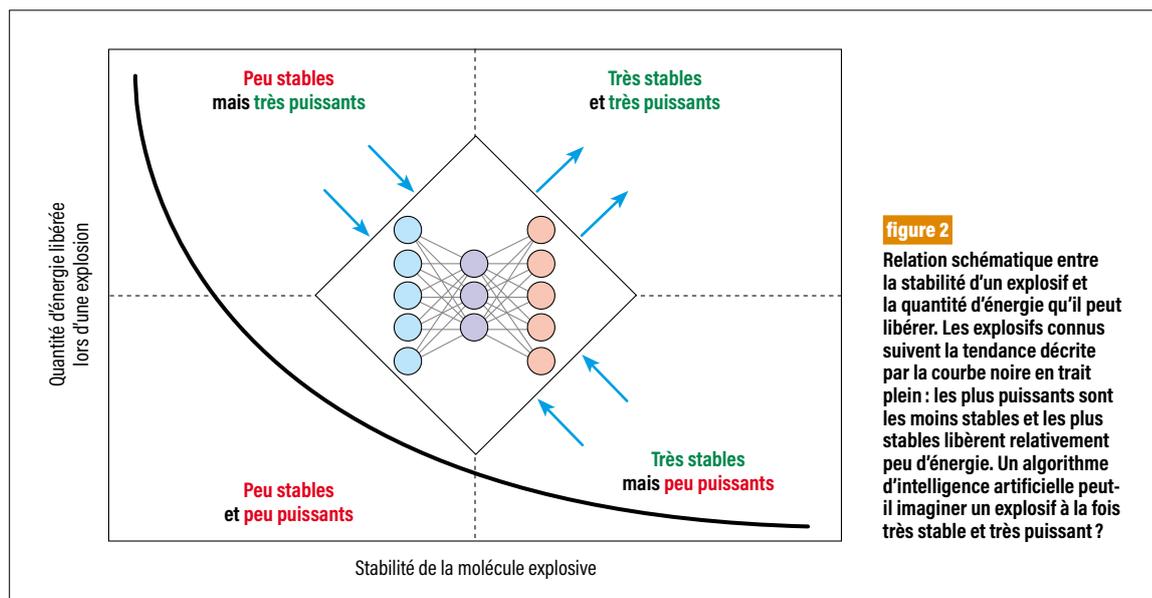


figure 2

Relation schématique entre la stabilité d'un explosif et la quantité d'énergie qu'il peut libérer. Les explosifs connus suivent la tendance décrite par la courbe noire en trait plein : les plus puissants sont les moins stables et les plus stables libèrent relativement peu d'énergie. Un algorithme d'intelligence artificielle peut-il imaginer un explosif à la fois très stable et très puissant ?

d'énergie, tout en restant parfaitement stables face aux potentiels accidents ou agressions (figure 2).

Contrairement à la performance, prévoir la stabilité d'un explosif en connaissant seulement sa structure moléculaire est un vrai casse-tête. Des premières réactions chimiques à la propagation de l'onde de choc dans le matériau, en passant par sa structure microscopique ou le procédé de fabrication, une multitude de contributions sont à prendre en compte. Et chacune de ces contributions constitue un domaine de recherche à part entière...

Pour ce type de problème très complexe, l'apprentissage automatique, une branche de l'intelligence artificielle, simplifie la vie des chercheurs. L'idée consiste à collecter le maximum de données expérimentales sur des molécules dont on connaît la stabilité pour les fournir à un algorithme d'apprentissage automatique qui va rechercher le meilleur modèle mathématique reliant ces données à la stabilité de l'explosif. Cette recherche ne se fait pas à l'aveugle ! L'algorithme est guidé par une fonction mathématique qui le force à minimiser l'écart entre ses prédictions et des valeurs de référence. Après apprentissage, on prévoit ainsi la stabilité en fonction d'autres données plus facilement accessibles.

Cette approche a plusieurs limites. Si les données collectées n'ont aucun rapport avec la stabilité, même le meilleur algorithme d'IA ne pourra faire aucune prédiction utile. La qualité des données d'apprentissage, difficile à

évaluer lorsque celles-ci proviennent de sources diverses et variées, impacte donc la capacité d'un modèle à représenter la réalité. Sa précision, quant à elle, dépend de la quantité de données accessibles. C'est la deuxième limite. Pour la stabilité thermique, nous constatons que multiplier par cent le nombre de données d'apprentissage permet de multiplier la précision par deux seulement. Aujourd'hui, trop peu d'explosifs sont caractérisés expérimentalement pour modéliser leur stabilité avec précision.

Parmi les méthodes d'apprentissage automatique (ou *machine learning*), les algorithmes d'apprentissage profond (ou *deep learning*) sont basés sur des réseaux de neurones artificiels. Ils se démarquent par leur capacité à générer de nouvelles données, similaires à celles rencontrées lors de l'apprentissage : c'est ce qu'on appelle l'intelligence artificielle générative. Par exemple, les algorithmes ChatGPT ou Dall-E reposent sur l'apprentissage profond. Sont-ils capables d'imaginer de nouveaux explosifs ?

Pour être entraînés, les algorithmes d'IA génératives nécessitent seulement un ensemble de données brutes. C'est un avantage par rapport à ceux de l'IA prédictive de propriétés, décrits plus haut, qui ont besoin de données préalablement caractérisées. Par contre, les neurones artificiels sont extrêmement gourmands. L'entraînement de la version 3 du cerveau de ChatGPT a nécessité un nombre de mots équivalent à une dizaine de millions de dictionnaires *Grand Larousse illustré*... De ce

point de vue, les chimistes ne sont pas en reste. Ils disposent de bases de données répertoriant plusieurs milliards de molécules. Une aubaine ! Cependant, seule une molécule sur dix millions se qualifie comme un possible explosif dans ces bases. Cela laisse trop peu d'exemples pertinents aux algorithmes de *deep learning* pour imaginer des molécules similaires.

Pour concevoir de nouveaux explosifs, l'apprentissage automatique est donc limité par le manque d'exemples représentatifs. Ces algorithmes ne représentent cependant qu'une partie des possibilités offertes par l'IA. D'ailleurs, le CEA - DAM développe actuellement une nouvelle approche : en s'appuyant sur les chimistes spécialistes des explosifs, elle dépasse ces limites et ouvre un nouvel horizon 3.

RÉFÉRENCES

- 1 C. Wespiser, D. Mathieu, « Application of machine learning to the design of energetic materials: preliminary experience and comparison with alternative techniques », *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, **48**, e202200264 <https://doi.org/10.1002/prop.202200264> (2023).
- 2 P. Schneider et al., « Rethinking drug design in the artificial intelligence era », *Nature Reviews Drug Discovery*, **19**, p. 353-364, <https://doi.org/10.1038/s41573-019-0050-3> (2020).
- 3 C. Wespiser, « Bottom-up exploration of synthetically accessible and domain-specific chemical spaces », à soumettre dans *Journal of Chemical Information and Modeling*.

A. Le Pichon, B. Poste, J. Vergoz, C. Listowski [CEA - DAM, centre DAM Île-de-France]
M. Charbit, F. Roueff [Laboratoire traitement et communication de l'information (LTCI),
Télécom Paris, Institut polytechnique de Paris, Palaiseau]

Quand une quatrième dimension révèle l'inaudible

Un signal peut en cacher un autre... Séparer des signaux issus de sources multiples, tel est le défi qu'a relevé une équipe du CEA - DAM avec un nouvel algorithme probabiliste de détection de signaux infrasonores **1**. Vraie rupture méthodologique, l'approche élaborée fournit une cartographie détaillée du bruit de fond d'origine naturelle (houle océanique, météorite, etc.) et artificielle (tirs de carrière, éoliennes, etc.) qui peut masquer le signal d'une explosion nucléaire, même de faible énergie, lointaine et souterraine. À ce jour, cette approche n'a pas d'équivalent dans la communauté internationale.

Dans le cadre de sa mission de surveillance contre la prolifération des armes nucléaires et du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Tice), le CEA - DAM traite en temps réel et analyse un volume en forte croissance de données issues d'un réseau mondial de stations infrasonores dans la bande de fréquences 0,05-4 Hz. Ces antennes acoustiques sont composées

de plusieurs capteurs de pression. Lorsque l'onde traverse l'antenne, elle atteint chaque capteur avec des temps d'arrivée différents. La mesure des retards de l'onde d'un capteur à l'autre permet de statuer sur la détection probable d'une onde et d'estimer sa direction d'arrivée et sa vitesse de passage afin de localiser un événement d'intérêt **(figure 1)**.

Depuis les années 2000, les traitements opérationnels de ces données reposent sur un algorithme appelé *Progressive Multi-Channel Correlation* (PMCC) **2**. Son originalité tient à son mode d'analyse 3D qui permet de représenter la vitesse et la direction d'arrivée du front d'onde dans l'espace temps-fréquence, afin d'aider l'analyste à identifier des sources perturbatrices caractérisées par des contenus fréquentiels différents. Les optimisations menées pour améliorer son efficacité en ont fait un outil fondamental au CEA - DAM **3**. Il est également intégré dans les chaînes de traitement automatique de l'organisation du Tice pour traiter en temps réel l'ensemble des données infrasonores du réseau mondial, actuellement composé de 53 stations.

L'exploration d'autres méthodes statistiques ouvre de nouvelles perspectives pour la détection et l'estimation lorsque les conditions d'enregistrement ne

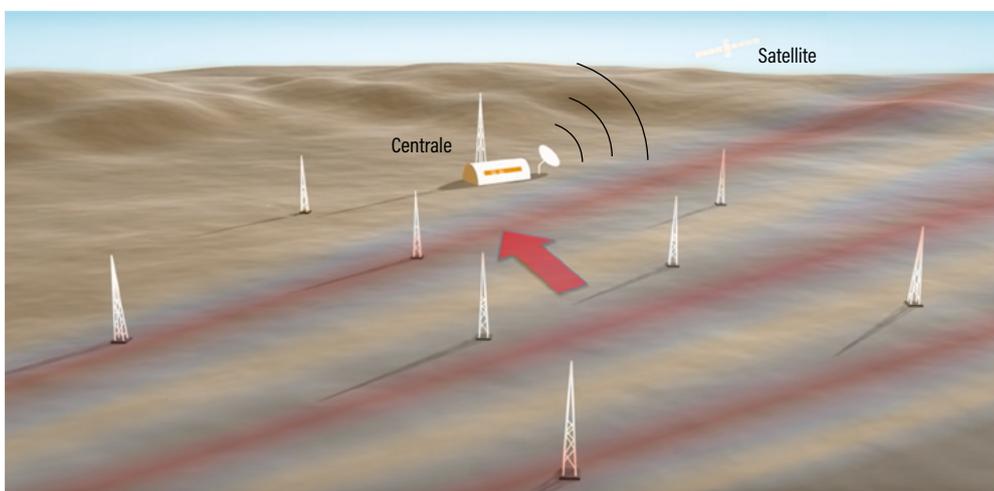
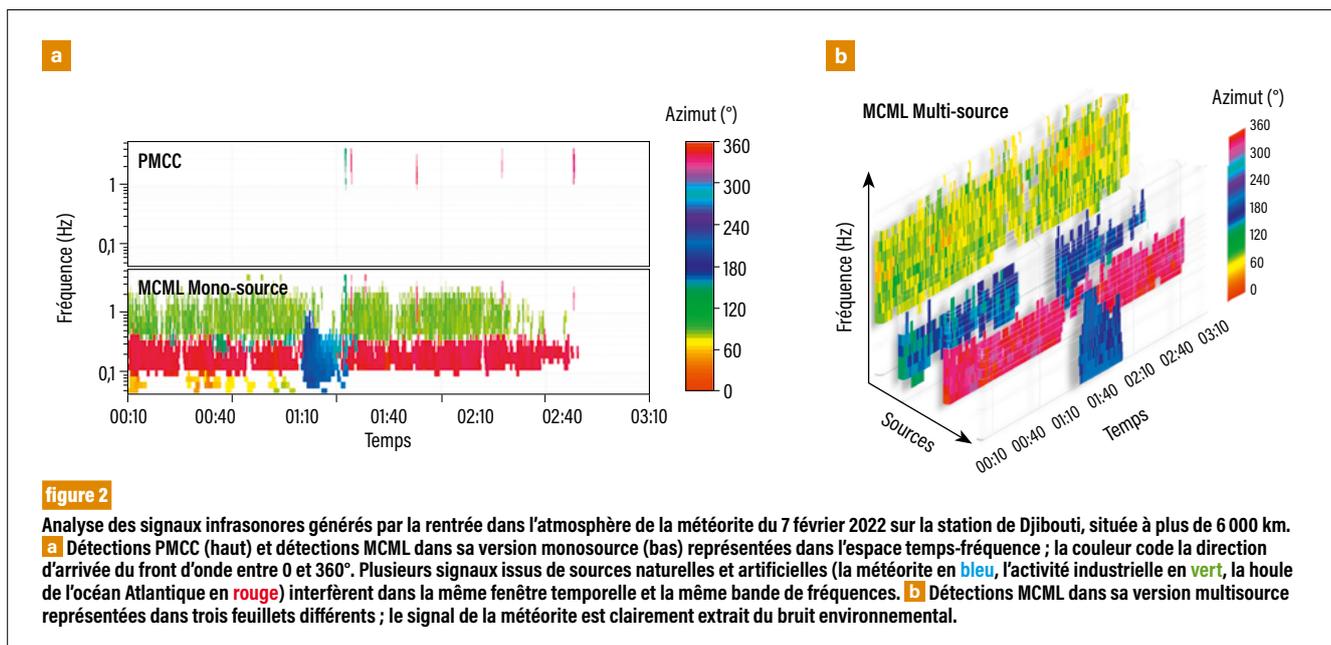


figure 1

Illustration de la propagation dans l'espace physique (plaine, collines) d'un front d'onde infrasonore traversant une station de mesure d'ouverture kilométrique, composée de huit capteurs de pression. Chaque capteur transmet ses données vers une centrale qui les communique par voie satellitaire. L'onde plane est caractérisée par sa direction d'arrivée (ou azimut) et sa vitesse horizontale. Si l'onde est enregistrée par une autre station, le croisement des directions d'arrivée fournit la localisation de la source.



sont pas optimales (bruit de fond dû à des rafales de vent, défaillance d'un capteur...). La collaboration historique du CEA – DAM avec Télécom Paris a permis de réaliser un état de l'art des méthodes statistiques de traitement d'antenne dans les domaines acoustique et radar. Les aspects fondamentaux abordés ont conduit en 2020 à l'élaboration d'un nouvel algorithme probabiliste basé sur une méthode de recherche en grille : l'algorithme *Multi Channel Maximum Likelihood* (MCML) **1**. Il permet d'explorer l'ensemble des solutions réalistes du couple direction d'arrivée-vitesse de passage pour en sélectionner la plus probable.

Les premières évaluations du nouvel algorithme sur des signaux synthétiques ont montré des capacités de détection supérieures au premier algorithme quand l'amplitude du signal devient inférieure à celle du bruit ambiant ou en présence de sources multiples qui interfèrent. Il fournit de plus à l'analyste une estimation rigoureuse des incertitudes des paramètres du front d'onde du signal détecté assortie d'une probabilité de fausse alarme. Le mode de recherche en grille qui lui est propre permet en outre de détecter plusieurs sources à la fois.

La **figure 2** compare les détections des deux algorithmes sur une période de trois heures. Dans cet exemple, l'événement d'intérêt est la désintégration d'une météorite dans l'atmosphère le

7 février 2022, vers 20h00 UTC, à environ 500 km de la côte de la Namibie et de l'Afrique du Sud. Selon le Center for Near Earth Object Studies (CNEOS) de la Nasa, l'énergie d'impact est de 7 kt d'équivalent TNT, environ la moitié de celle de la bombe d'Hiroshima. Cet événement a été détecté à l'échelle globale par vingt stations. Cependant, pour certains sites comme celui de Djibouti, les signaux reçus sont noyés dans un paysage infrasonore complexe caractérisé par la présence de signaux concomitants issus de sources naturelles et artificielles. Contrairement au premier algorithme, le nouvel algorithme version monosource appliqué aux enregistrements de la station de Djibouti, située à 6 000 km du point de rentrée de la météorite, révèle dans les trois dimensions de temps, de fréquence et de direction d'arrivée le signal recherché et fournit de plus une cartographie fine du bruit environnemental (**figure 2a**). Dans sa version multisource, le nouvel algorithme ouvre la voie à une quatrième dimension pour restituer une image multicouche de signaux interférant afin de mieux révéler tout type d'événement d'intérêt (**figure 2b**). À ce jour, cette approche n'a pas d'équivalent dans la communauté internationale.

Initialement implémenté pour traiter une bande de fréquences unique, le nouvel algorithme bénéficie directement du découpage fréquentiel logarithmique

du premier (18 bandes réparties entre 0,05 et 4 Hz). Le code a par ailleurs été optimisé et parallélisé pour réduire significativement les temps de calcul. Par rapport à sa version originale, le coût de calcul a été réduit d'environ trois ordres de grandeur, autorisant une mise en production pour des traitements en temps réel. Ce nouvel outil représente une rupture méthodologique qui s'inscrit dans la continuité des travaux de R&D menés ces vingt dernières années au CEA – DAM. L'expertise du CEA – DAM pour la mise en œuvre de chaînes de traitement automatique des données facilitera son exploitation opérationnelle prévue en 2025.

RÉFÉRENCES

- 1** B. Poste, M. Charbit, A. Le Pichon, C. Listowski, F. Roueff, J. Vergoz, « The multichannel maximum-likelihood (MCML) method: a new approach for infrasound detection and wave parameter estimation », *Geophysical Journal International*, **232**, p. 1099-1112, <https://doi.org/10.1093/gji/ggac377> (2023).
- 2** P. Gaillard, J. Vergoz, A. Trilla, « Techniques de détection et traitement massif de données », dans *Détection des essais nucléaires – À l'écoute du globe*, revue *chocs*, **50**, p. 49-57 (2020).
- 3** A. Nouvellet, M. Charbit, F. Roueff, A. Le Pichon, « Slowness estimation from noisy time delays observed on non-planar arrays », *Geophysical Journal International*, **198**, p. 1199-1207, <https://doi.org/10.1093/gji/ggu197> (2014).

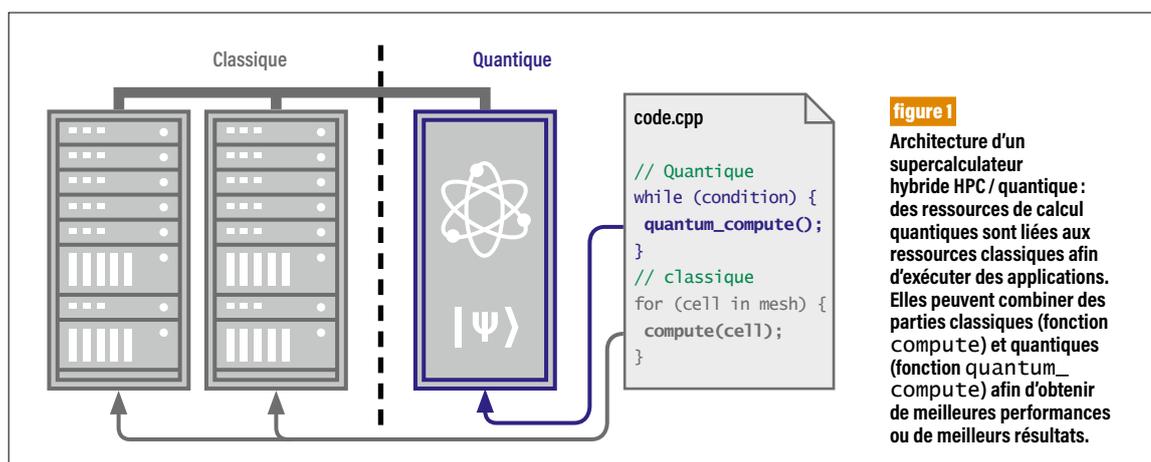
B. Chichereau, P. Carribault [CEA – DAM, centre DAM Île-de-France
Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire d’informatique haute performance pour le calcul
et la simulation (LiHPC), Bruyères-le-Châtel]
S. Vialle [Laboratoire interdisciplinaire des sciences du numérique, UMR 9015 CNRS –
Université Paris-Saclay – CentraleSupélec – Inria, Gif-sur-Yvette]

Le calcul quantique peut-il accélérer les supercalculateurs ?

Les processeurs quantiques s’appuient sur des phénomènes quantiques pour effectuer des calculs. Pour évaluer leur apport, une voie possible est de les intégrer aux supercalculateurs existants puis d’adapter les programmes. Ils sont parfois présentés comme une solution miracle dans la presse grand public, mais les réalisations concrètes sont rares et il convient de rester prudent sur leurs capacités. C’est dans cette perspective que le CEA – DAM les évalue pour améliorer les performances des supercalculateurs **1**.

Le calcul haute performance s’appuie sur des ordinateurs (ou supercalculateurs) capables d’exécuter rapidement une quantité importante de calculs. Par exemple, ces supercalculateurs sont capables de simuler à grande échelle des phénomènes physiques complexes pour les besoins du CEA – DAM. Cela peut être mené à bien grâce à des processeurs classiques, capables d’exécuter plusieurs millions de milliards d’opérations par seconde.

Depuis quelques années, un nouveau type de processeur émerge, fondé sur la physique quantique : les processeurs ou accélérateurs quantiques. Contrairement aux bits classiques qui valent exclusivement 0 ou 1, les systèmes quantiques possèdent des propriétés telles que la superposition, possibilité de porter plusieurs valeurs à la fois entre 0 et 1 au sein d’un bit quantique, ou qubit. Pour réaliser des calculs, la superposition peut être combinée avec l’intrication, possibilité de lier ensemble plusieurs qubits. Ces derniers sont pertinents pour des problèmes se prêtant bien à la formulation des opérations quantiques **2**. De nombreuses technologies matérielles sont proposées pour faire du calcul quantique et l’adaptation d’un code existant dépend de la technologie choisie, ce qui complique la tâche des programmeurs.



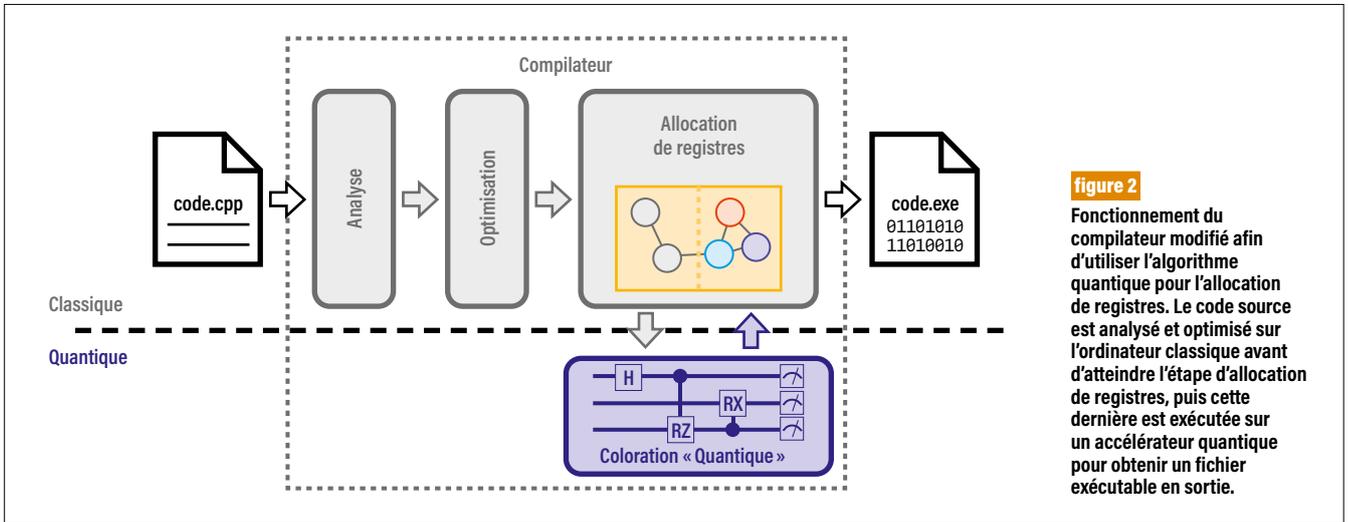


figure 2 Fonctionnement du compilateur modifié afin d'utiliser l'algorithme quantique pour l'allocation de registres. Le code source est analysé et optimisé sur l'ordinateur classique avant d'atteindre l'étape d'allocation de registres, puis cette dernière est exécutée sur un accélérateur quantique pour obtenir un fichier exécutable en sortie.

Un accélérateur quantique peut être vu comme un nouveau processeur permettant d'accélérer certains calculs **3**. Une équipe alliant le CEA – DAM et le Laboratoire interdisciplinaire des sciences du numérique a étudié la possibilité de l'intégrer dans les supercalculateurs (voir la **figure 1**). Du fait de l'état balbutiant des technologies quantiques, il est nécessaire d'identifier un problème qui se prête bien au paradigme quantique. L'équipe a ainsi choisi

d'explorer les potentiels gains pendant la compilation des programmes, le processus permettant de traduire le code en langage binaire qui pourra être exécuté par un processeur classique. Le programme est analysé puis optimisé avant d'atteindre une étape importante, appelée allocation de registres, qui consiste à assigner les variables manipulées à des entités matérielles qui stockent des résultats intermédiaires. L'utilisation d'accélérateurs quantiques a ainsi été

explorée en exprimant l'allocation de registre en algorithme quantique dans un compilateur moderne (voir **figure 2**).

Un modèle de programmation développé par Eviden (anciennement Atos) a été utilisé pour exprimer le nouvel algorithme quantique. La **figure 3** présente la comparaison des résultats expérimentaux de cette approche avec un algorithme classique d'allocation **4**. L'algorithme quantique permet de surcroît d'améliorer la qualité du code compilé dans certains cas, car il utilise mieux les registres. Le calcul quantique peut ainsi apporter de réels gains, mais le portage des programmes est un travail substantiel.

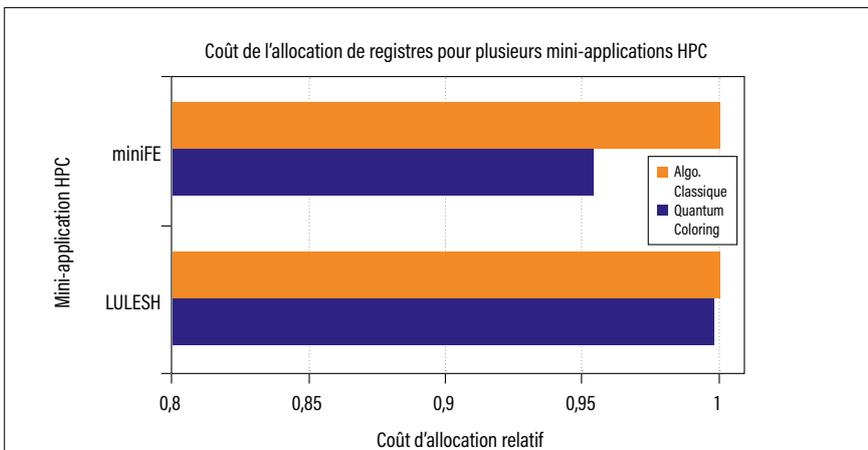


figure 3 Résultats des expérimentations obtenus à l'aide d'un émulateur de machine quantique. Cette figure compare les coûts des allocations, qui sont liés au temps d'exécution des codes compilés, entre l'algorithme quantique (en bleu) et une approche classique **4** qui sert de base aux allocateurs modernes (en orange). L'algorithme obtient de meilleures performances pour la compilation du code miniFE (éléments finis implicites) alors que dans le cas de Lulesh (hydrodynamique), les performances des deux algorithmes sont comparables. Le calcul quantique est intéressant dans certains cas, mais n'est pas adapté à la résolution de tous les problèmes.

RÉFÉRENCES

1 B. Chichereau, S. Vialle, P. Carribault, « Experimenting with hybrid quantum optimization in HPC software stack for CPU register allocation », *2023 IEEE International Conference on Quantum Computing and Engineering (QCE)*, <https://doi.org/10.1109/QCE57702.2023.10197> (2023).

2 P. W. Shor, « Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring », *Proc of the 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, Santa Fe, États-Unis, p. 124-134 (1994).

3 T. Humble, A. McCaskey, D. Lyakh, M. Gowrishankar, A. Frisch, T. Monz, « Quantum computers for high-performance computing », *IEEE Micro*, **34**(1), p. 15-23 (2021).

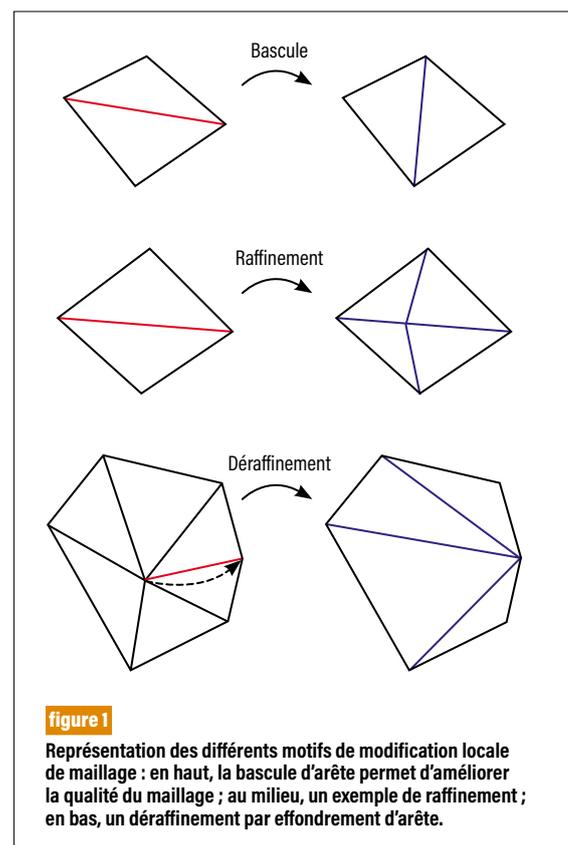
4 G. J. Chaitin, « Register allocation & spilling via graph coloring », *ACM SIGPLAN Notices*, **17**(6), p. 98-101 (1982).

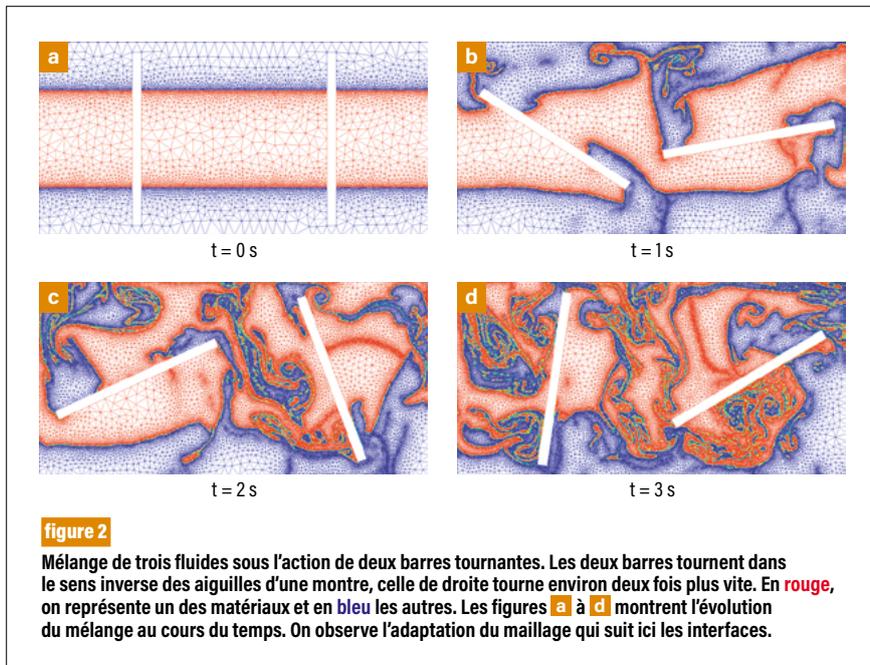
De l'art d'adapter le maillage pour des calculs robustes et précis

Aéronautique, fusion par confinement inertiel... Dans de nombreux domaines, la simulation numérique d'écoulements de fluides compressibles est un outil essentiel. Dans le cas d'applications comme celles du programme Simulation du CEA - DAM, ces calculs peuvent être coûteux. Pour la simulation d'écoulements impliquant plusieurs matériaux, les méthodes dites lagrangiennes sont souvent utilisées pour leur précision, mais peuvent échouer en présence de tourbillons ou de cisaillement. Une équipe du CEA - DAM a proposé une approche originale **1** couplant une méthode lagrangienne et une méthode d'adaptation locale de maillage, qui améliore la robustesse, la précision et réduit le coût des calculs.

La simulation numérique de phénomènes physiques requiert généralement l'utilisation d'un maillage, découpage du domaine de calcul en éléments simples, des triangles dans notre méthode. Le maillage permet la discrétisation des équations et leur résolution sur ordinateur. L'analyse numérique formalise rigoureusement que la qualité de la solution discrète est intimement liée au choix du maillage et permet d'en sélectionner un bien adapté à un calcul donné. Dans le cas d'écoulements non stationnaires, la position des chocs et des tourbillons par exemple peut varier au cours du temps, il est donc difficile de construire *a priori* un maillage qui convienne tout au long de la simulation. Nous avons donc mis en œuvre une méthode automatique **1** qui modifie le maillage pendant le calcul afin de nous assurer de trois critères : le maillage est de bonne qualité (les triangles ne sont pas trop étirés), le maillage est fin là où la solution varie beaucoup (pour améliorer la précision) et plus grossier ailleurs (pour réduire le coût du calcul).

L'intérêt des méthodes lagrangiennes est que le maillage suit les mouvements du fluide. Elles sont donc particulièrement adaptées pour simuler des écoulements à plusieurs matériaux. En effet, elles préservent exactement les interfaces entre matériaux et sont donc précises par nature. Notre travail, inspiré de **2**, consiste à modifier le maillage localement, ce qui permet de conserver une approche presque lagrangienne. Moins d'une maille sur cent est concernée par l'adaptation à chaque pas de temps. Partant d'un maillage au temps t^n , la méthodologie s'articule





en trois étapes. Tout d'abord, la solution numérique donnée par l'étape lagrangienne est calculée au temps t^{n+1} . Ensuite, on adapte localement le maillage **2** au nouveau temps. Enfin, on projette la solution numérique sur le maillage adapté. On peut alors continuer le calcul.

Précisons d'abord un point essentiel. Le bon fonctionnement de cette méthode dépend de l'utilisation de méthodes de volumes finis **3,4** développées au CEA – DAM. En effet, nous avons démontré qu'elle conduit à la convergence vers des solutions physiques de la dynamique des fluides **1**.

La technique d'adaptation locale que nous proposons **1** ne requiert que trois motifs simples de modifications de maillage (voir **figure 1**). Le premier permet l'amélioration de la qualité du maillage : considérant deux triangles partageant une arête, on échange l'arête si les triangles obtenus sont plus réguliers. Le second motif permet de découper une arête jugée trop longue en y insérant un sommet ; c'est le raffinement. Enfin, si une arête est trop courte, on la supprime

en déplaçant un de ses sommets sur l'autre ; c'est le déraffinement. Ainsi, chaque modification du maillage est locale, elle ne concerne que des triangles partageant une arête ou un sommet.

Il reste à décrire les critères qui permettent de décider si une arête est trop longue ou trop courte. Pour cela, on choisit une fonction longueur. Là où la solution varie peu, cette longueur est localement grande : on déraffine le maillage. Au contraire, là où la solution varie beaucoup, la longueur prescrite est petite : on la raffine.

Après chaque modification de maillage, la solution numérique est calculée sur les nouvelles mailles ; c'est l'étape de la projection. Elle est obtenue en calculant l'intersection géométrique exacte entre les nouveaux et les anciens triangles. Cette opération est locale et simple à mettre en œuvre. Associées à l'utilisation des méthodes de volumes finis lagrangiennes **3,4**, les conservations de la masse, de l'impulsion et de l'énergie totale sont assurées naturellement. Nous avons démontré dans **1** qu'avec cette projection, l'approche est

stable. Ces propriétés sont indispensables pour des simulations de fluides compressibles.

L'approche que nous avons développée est peu coûteuse en comparaison de méthodes de remaillage globales. De plus, elle est extrêmement robuste et très compétitive pour des écoulements présentant des tourbillons, comme celui représenté sur la **figure 2**. Enfin, cette adaptation locale facilite grandement la programmation sur calculateur parallèle. Ce travail se poursuivra naturellement par son extension à trois dimensions. Il s'agira de s'assurer que les performances de la méthode sont aussi bonnes qu'à deux dimensions

RÉFÉRENCES

- 1** S. Del Pino, I. Marmajou, « Triangular metric-based mesh adaptation for compressible multi-material flows in semi-Lagrangian coordinates », *Journal of Computational Physics*, **478**, 111975 (2023).
- 2** C. Dobrzynski, *Adaptation de maillage anisotrope 3D et application à l'aérothermique des bâtiments*, thèse de doctorat de l'université Pierre-et-Marie-Curie - Paris VI soutenue le 28 novembre 2005.
- 3** B. Després, C. Mazeran, « Lagrangian gas dynamics in two dimensions and Lagrangian systems », *Arch. Rational Mech. Anal.*, **178**, p. 327-372 (2005).
- 4** P.-H. Maire, R. Abgrall, J. Breil, J. Ovardia, « A cell-centered Lagrangian scheme for two-dimensional compressible flow problems », *SIAM J. Sci. Comput.*, **29**, p. 1781-1824 (2007).

N°18 / JUILLET 2024

CHOCS AVANCÉES

Bilan 2023 des publications
et de la vie scientifique
de la Direction des
applications militaires



À PARAÎTRE

REVUE CHOCS N° 54

Apprentissage automatique
Intelligence artificielle

N°18 / JUILLET 2024

CHOCS AVANCÉES



BILAN 2023 DES PUBLICATIONS ET DE LA VIE SCIENTIFIQUE
DE LA DIRECTION DES APPLICATIONS MILITAIRES

www-dam.cea.fr