cpos avancées 2008

Avancées scientifiques et techniques de la Direction des applications militaires







Daniel Verwaerde, Directeur des applications militaires du CEA

Cinquante ans et plein d'avenir !

Comment évoquer 2008 sans rappeler le cinquantième anniversaire de la Direction des applications militaires du CEA ? Le 23 octobre de nombreuses personnalités réunies à l'Ecole Militaire ont exprimé leur confiance et leur admiration pour notre institution. Le Ministre de la Défense, Hervé Morin, le Chef d'État Major des Armées, Jean-Louis Georgelin, le Délégué général pour l'armement, Laurent Collet-Billon, le Délégué à la sureté nucléaire et à la radioprotection pour les activités et installations intéressant la Défense, Marcel Jurien de la Gravière, ont rappelé devant près de 700 invités que la DAM a écrit une page importante de l'histoire de la dissuasion française, et souligné la qualité scientifique et technique de ses travaux. Nos partenaires des laboratoires américains, britanniques et russes ont également apporté leur témoignage amical.

Cet anniversaire fut l'occasion de revenir sur les temps forts de l'histoire de la DAM. Tout d'abord l'ère des pionniers pendant laquelle se sont créés les centres de la DAM : Vaujours, Bruyères-le-Châtel, Limeil, Valduc et plus tard le Ripault et le CESTA. Tout inventer en quelques mois pour arriver, le 13 février 1960, au premier essai nucléaire français Gerboise bleue. Puis vient l'ère des grands chantiers, qui conduit à la construction d'une DAM à la fois scientifique et industrielle, capable de concevoir une force de frappe basée sur des systèmes d'armes toujours plus performants face à des défenses adverses toujours plus fortes. Cette période s'illustre par de grands résultats : l'atteinte du thermonucléaire en 1968, les charges tactiques en 1970, les charges thermonucléaires sur missiles en 1972, les têtes multiples en 1985, le missile aéroporté ASMP en 1986, les têtes furtives en 1995.

L'arrêt des essais nucléaires, en 1996, marque une rupture importante. La DAM a su anticiper cette période en préparant une ultime campagne d'essais et en posant les principes de la garantie sans essais nucléaires qui s'appuie sur le nouveau concept de "charge robuste". Elle a, pour cela, profondément transformé son organisation, adapté son effectif, et surtout mis en place les programmes stratégiques propres à répondre aux nouveaux besoins de la Défense. Le programme Simulation garantit sur le long terme la sûreté et la fiabilité des armes de la dissuasion. Un second programme pilote à la fois la gestion des matières stratégiques et les questions de non-prolifération et d'environnement. Il s'agit là d'une orientation visionnaire qui, quelque part, trouvera sa consécration dans la décision du Président Nicolas Sarkozy, en 2007, de commander un nouveau Livre Blanc traitant à la fois de la défense et de la sécurité nationale.

Les grands jalons de ces programmes ont tous été franchis avec succès : la machine de radiographie AIRIX mise en service en 2000, les grands ordinateurs de la famille TERA installés en 2001 pour le 5 Tflops et en 2005 pour le 50 Tflops. La LIL, prototype du LMJ, a démarré en 2002 et permet depuis 2004 de réaliser des expériences de physique des hautes densités d'énergie dans des domaines jamais atteints jusqu'à présent en Europe. De nouvelles étapes s'annoncent pour les années à venir : 2010 pour la nouvelle machine TERA à 1 Petaflops et 2014 pour les premières expériences de physique sur le LMJ.



Le Chef d'État Major des Armées, Jean-Louis Georgelin (à l'Amphithéâtre Foch de l'École Militaire)

La propulsion nucléaire est devenue une mission de la DAM en 2000. De grandes avancées ont été réalisées ces dernières années comme la livraison des cœurs des quatre sous-marins nucléaires lanceurs d'engins de nouvelle génération, fers de lance de notre dissuasion. L'avenir se prépare également avec les réacteurs de nouvelle génération qui équiperont le futur sous-marin nucléaire d'attaque, le Barracuda, et le réacteur d'essais RES en construction à Cadarache.

Nous avons tous en mémoire les paroles chaleureuses du Ministre de la Défense au soir des cérémonies organisées à l'École Militaire à Paris : "... Je voulais donc simplement vous dire une seule chose : vous avez participé et avez été les bâtisseurs de la dissuasion française, vous avez participé à l'innovation et à la recherche française, et ce que je vous souhaite, c'est que, avec la même passion, avec la même générosité, avec la même volonté de créer, vous bâtissiez l'indépendance de la dissuasion et de la sécurité du pays pour les décennies qui viennent." L'histoire de la DAM, c'est également 50 années d'avancées scientifiques et techniques. Toutes sont loin d'avoir été publiées en raison du caractère classifié ou proliférant de leurs applications. Nous avons cependant tenu à illustrer quelques uns des grands résultats scientifiques de la DAM. Pour cela, un article de "mémoire collective" est inclus en encarté de ce numéro. Il retrace 50 ans de découvertes scientifiques qui ont conduit à la DAM d'aujourd'hui. La simulation, la surveillance des traités, la lutte contre la prolifération sont nées d'une multitude de travaux menés tout au long de ces années dans nos laboratoires.

Depuis 1996, la politique d'ouverture soutenue par la Défense a donné une plus grande visibilité à nos travaux. La DAM a considérablement augmenté le nombre de ses publications. En 2008, on relève plus de 200 publications dans des journaux de rang A et plus de 350 interventions dans des congrès inter-nationaux. De nombreux prix scientifiques couronnent des travaux réalisés par nos chercheurs. Depuis 2006, "chocs Avancées" sélectionne chaque année quelques unes des meilleures publications de la DAM et les propose à ses lecteurs de façon synthétique et accessible.

Comme vous pourrez en juger à la lecture de cette revue, les résultats 2008 sont à la hauteur des défis que nous devons relever. Je voudrais en souligner deux :

- La physique autour des lasers, aussi bien pour améliorer notre compréhension de l'interaction laser-matière que pour accroître le champ des applications de ces installations. Elle permet d'imaginer de nouveaux instruments de mesure autour des expériences de plus en plus complexes et ambitieuses ;
- Le calcul haute performance se situe au cœur du programme Simulation. Enjeu de premier plan pour la DAM, il l'est également pour la recherche française. C'est pourquoi l'Agence nationale pour le Calcul Intensif a réalisé un effort sans précédent pour accroître les capacités des grands centres de calcul français et pour promouvoir l'utilisation de ces moyens par les chercheurs. À la DAM, cette orientation stratégique trouve de nombreuses avancées.

Bien sûr, d'autres thèmes sont également à l'honneur dans ce numéro. C'est dans cette diversité que la DAM puise sa force et sa capacité d'innovation au service de l'Etat.

Daniel Verwaerde

Directeur des applications militaires du CEA



Le Ministre de la Défense, Hervé Morin (à la Rotonde de l'École Militaire)

COMPRESSION D'IMPULSION PAR FILAMENTATION : VERS LE CYCLE OPTIQUE

L. BERGÉ*, S. SKUPIN**, G. STEINMEYER*** *CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE, **MAX-PLANCK INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME, DRESDEN, ALLEMAGNE, ***MAX-BORN INSTITUT FÜR NICHTLINEARE OPTIK, BERLIN, ALLEMAGNE

Des impulsions laser femtosecondes (1 fs = 10⁻¹⁵s) s'auto-focalisant dans une cellule de gaz présentent la particularité de se comprimer en temps après une phase de défocalisation induite par un plasma d'électrons. Cette propriété permet de produire des sources ultrabrèves approchant le cycle optique. Nous présentons des simulations numériques reproduisant les différentes dynamiques qu'une impulsion opérant à 800 nm développe dans une cellule d'argon, impliquant sa phase de filamentation dans le gaz, la traversée de la fenêtre en sortie de cellule, et sa propagation finale dans l'air. Nous montrons que la traversée de la fenêtre élargit significativement l'impulsion, mais que celle-ci se recomprime dans l'air.

Depuis l'avènement des sources laser amplifiées par dérive de fréquence, des progrès considérables ont été réalisés dans le domaine de la compression optique. Des premières impulsions ultrabrèves créées dans des fibres creuses [1] aux techniques récentes exploitant des filaments de lumière intense [2], l'idée omniprésente a été d'accroître largement le spectre optique, de façon à atteindre des durées d'impulsion les plus courtes possibles. Plusieurs phénomènes altèrent la dynamique d'un faisceau laser au cours de sa propagation. En particulier, un faisceau dont la puissance initiale est supérieure au seuil d'auto-focalisation voit son profil spatial se contracter par effet Kerr. Cette auto-focalisation conduit à une augmentation de l'intensité laser, jusqu'à l'ionisation des atomes du milieu. Le plasma d'électrons ainsi généré défocalise partiellement l'impulsion. De l'équilibre entre l'auto-focalisation optique et la défocalisation plasma naît un filament de lumière capable de se propager sur de grandes distances. Cette dynamique de filamentation est modélisée à partir d'une équation de Schrödinger non linéaire étendue, couplée à une équation source décrivant l'ionisation du milieu.

Un compresseur à filaments

De nombreuses études ont été consacrées à l'autocompression de la lumière par des filaments [2], [3]. Les taux de compression permettent d'atteindre 2 à 3 cycles optiques pour des impulsions infrarouges (1 cycle optique \approx 3 fs à 800 nm), offrant ainsi des perspectives prometteuses pour la production d'impulsions attosecondes (1 as = 10⁻¹⁸ s) isolées [4]. Une impulsion s'auto-focalisant subit de la défocalisation plasma, ce qui modifie sa distribution temporelle. Il est possible de raccourcir efficacement cette distribution en optimisant la phase de diffraction au cours de laquelle les composantes de l'impulsion les moins intenses se dispersent rapidement. L'impulsion résultante présente alors un profil en temps fortement réduit [5]. Un exemple d'auto-compression est montré en figure 1, où une impulsion de durée initiale de 35 fs est focalisée dans une cellule d'argon. La figure 1**a** montre l'auto-focalisation de l'impulsion et son étape de diffraction lente après défocalisation plasma. L'impulsion se comprime alors sur des durées proches de 6 fs. Celles-ci sont préservées sur quelques dizaines de cm autour de la distance z = 0,7 m (figure 1**b**).



b Dynamique temporelle de l'impulsion dans le plan (t,z).

Une auto-compression effective n'est cependant pas garantie : l'impulsion doit en effet traverser la fenêtre de silice obstruant la cellule, puis se propager dans l'air sur les quelques dizaines de cm la séparant des diagnostics. Or, la fenêtre en verre possède une dispersion suffisamment élevée pour au moins doubler la durée du faisceau sur moins d'un mm d'épaisseur. Comme montré en figure 2, deux profils d'impulsions collectés aux distances z = 1 m et z = 1,5 m de la cellule simulée en figure 1 sont systématiquement élargis à plus de 25 fs en durée, après avoir traversé 0,5 mm de silice seulement.



Figure 2

Profils dans le plan (x,t) montrant l'élargissement temporel de l'impulsion simulée en figure 1 et collectée après **(I)** 1 m et **(II)** 1,5 m de propagation dans la cellule d'argon.

Néanmoins, l'élargissement induit par la fenêtre de silice peut être compensé durant la dernière étape de propagation atmosphérique [6]. La fenêtre de verre introduit en effet une phase non linéaire dans le faisceau. Cette phase provoque un effet de lentille dans le dernier milieu de propagation, où l'impulsion se refocalise et subit une ultime recompression en temps. La figure 3 montre à ce propos l'évolution des impulsions (I) et (II) de la figure 2, qui se recompriment dans l'air sur 10 fs environ. Ce comportement justifie les mesures expérimentales rapportées dans [4].

Conclusion

Les études menées en 2008 ont permis de mettre en évidence l'existence d'un régime générique de filamentation au cours duquel une impulsion femtoseconde peut atteindre entre 2 et 3 cycles optiques dans une cellule d'argon [5]. Elles ont aussi démontré la robustesse du phénomène d'auto-compression à travers toutes les étapes de propagation subies par un filament dans cette configuration [6]. Les compresseurs optiques opérant par filamentation sont donc robustes et prometteurs pour la production de nouvelles sources ultrabrèves.

Références

 M. NISOLI *et al.*, "Compression of high energy laser pulses below 5 fs", *Opt. Lett.*, **22**, p. 522-524 (1997).
 L. BERGÉ, S. SKUPIN, R. NUTER, J. KASPARIAN, J.-P. WOLF, "Ultrashort filaments of light in weakly ionized, optically transparent media", *Rep. Prog. Phys.*, **70**, p. 1633-1713 (2007).

[3] G. STIBENZ, N. ZHAVORONKOV, G. STEINMEYER, "Self-compression of millijoule pulses to 7.8 fs duration in a white-light filament", *Opt. Lett.*, **31**, p. 274-276 (2006).
[4] G. SANSONE *et al.*, "Isolated single-cycle attosecond pulses", Science, **314**, p. 443-446 (2008).

[5] L. BERGÉ, S. SKUPIN, "Few-cycle light bullets created by femtosecond filaments", *Phys. Rev. Lett.*, **100**, p. 113902 (1-4) (2008).

[6] L. BERGÉ, S. SKUPIN, G. STEINMEYER, "Temporal self-restoration of compressed optical filaments", *Phys. Rev. Lett.*, **101**, p. 213901 (1-4) (2008).



ASTROPHYSIQUE DE L'ABORATOIRE : DES L'ASERS POUR COMPRENDRE L'UNIVERS

S. BOUQUET, E. FALIZE, B. LOUPIAS CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE

L'astrophysique de laboratoire est une nouvelle thématique visant à étudier des phénomènes et objets astrophysiques en laboratoire, à l'aide de lasers de puissance. Le lien entre le plasma laser et celui d'astrophysique est établi par des lois d'échelle, étudiées pour différents régimes d'hydrodynamique radiative. Pour la première fois, la pertinence de ces expériences pour l'astrophysique est démontrée de façon rigoureuse.



L'astrophysique de laboratoire (*AL*) a pour objectif l'étude de phénomènes et d'objets astrophysiques à partir d'expériences d'interaction laser-matière.

Bien que ces expériences soient nouvelles, la démarche date du début du XIX^e siècle lorsque le savant français *J. Fourier* étudia le refroidissement du globe terrestre en examinant l'évolution de la température d'une boule chaude de fer, de plusieurs centimètres de rayon [1]. Il venait de créer une maquette ou un "modèle réduit" de la Terre. Cette approche peut être considérée comme les premiers pas de l'AL. Pour faire le lien entre la sphère et la Terre, il faut utiliser des "lois d'échelle".

Deux mille ans avant J.-C. ces lois d'échelle étaient déjà connues. Les Babyloniens avaient noté qu'en prenant des cercles de diamètres D différents, le quotient p/D (p est le périmètre) valait toujours π . Cette propriété montre que les cercles obéissent à une loi d'échelle "géométrique".

Dans le cadre de l'AL, en plus de l'extension spatiale, notée x, les lois d'échelle agissent aussi sur le temps t, la vitesse v et sur toutes les grandeurs physiques (densité ρ , pression P...) relatives au phénomène ou à l'objet étudié. L'AL a débuté aux Etats-Unis vers 1990 pour aboutir en 1999 à la première réalisation française [2]. Elle bénéficie de l'état de l'art le plus avancé à propos des lasers et diagnostics, des codes numériques, et des méthodes analytiques, comme la théorie des groupes. Celle-ci mène à une justification rigoureuse des lois d'échelle à partir des modèles mathématiques décrivant les phénomènes astrophysiques. Elle montre comment un plasma laser de quelques mm³ et d'une durée de quelques ns est représentatif de l'astrophysique où interviennent des échelles d'espace et de temps très différentes (par exemple, le rayon du Soleil vaut 700 000 km et il vivra pendant 10 milliards d'années. Mille ans après l'explosion, un reste de supernova



a un rayon d'environ 3.10¹⁶ m, soit un parsec...). Considérons le cas des jets d'étoiles jeunes. Sur la figure 1, l'un d'entre eux (*HH 111*) est comparé à des jets expérimentaux de plasma obtenus auprès du laser LULI 2000 avec une impulsion de 1 ns et une énergie sur cible de 600 J. Bien que les rapports d'aspect ne soient pas identiques, les tendances sont bonnes et l'accord avec la théorie est correct. La figure 1b montre une radiographie protonique de l'interaction de la tête d'un jet avec un milieu ambiant. L'effet est net car nous voyons un choc d'étrave et des "bosses" dues sans doute à l'instabilité de *Rayleigh-Taylor*. Des dépouillements plus fins seront nécessaires pour vérifier ces hypothèses et mieux comprendre la formation et la propagation des jets astrophysiques.

Bien que les équations (conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie) modélisant les jets ne soient pas intégrables analytiquement, nous pouvons déduire des relations caractérisant leurs solutions, l'existence de résultats expérimentaux "homothétiques" à ce que nous voyons dans le ciel. Ces relations prouvent qu'en un point x, à l'instant t, la vitesse v(x,t) vérifie que la quantité $I_1 = v(x,t) \cdot t/x$ est un invariant du système considéré. C'est aussi vrai pour $I_2 = (p(x,t).t)/(x.\rho(x,t).v(x,t))$. D'autres invariants existent et on déduit que deux nombres sans dimension $A \equiv \rho_{astro} / \rho_{lab}$ et $B \equiv P_{astro} / P_{lab}$ sont libres (les quantités indicées "astro" et "lab" sont les grandeurs typiques du jet astrophysique et de laboratoire, respectivement) [5]. De plus, la structure des équations indique que les autres rapports satisfont $x_{astro}/x_{lab} \equiv B/A^2$, $t_{astro}/t_{lab} \equiv (B/A^3)^{1/2}$, $v_{astro}/v_{lab} \equiv (B/A)^{1/2}$ et $T_{astro}/T_{lab} \equiv B/A$ (T est la tempé*rature*). Les valeurs de A et B sont déterminées à partir de données expérimentales et astrophysiques. En effet, nous savons que la longueur typique des jets expérimentaux est $x_{lab} \approx 1$ mm et celle des jets d'étoiles

vaut $x_{astro} \approx 0,1$ parsec. L'observation indique aussi que les jets se propagent à $v_{astro} \approx 100$ km/s. Nous avons alors $t_{astro} \approx 1000$ ans. Comme avec les sources laser utilisées, nous avons $t_{lab} \approx 10$ ns, nous trouvons $A \approx 3B \approx 2.10^{-19}$ en utilisant les lois analytiques précédentes.

Grâce à ces valeurs, on peut déduire ρ_{lab} à partir de la densité observée dans les jets astronomiques. Ces observations donnent $\rho_{astro} \approx 2.10^{-22} \text{ g/cm}^3$ et on trouve $\rho_{lab} \approx 1 \text{ mg/cm}^3$. Ce résultat est en accord avec la valeur expérimentale obtenue à partir de cônes remplis de mousse de CH, de densité initiale égale à 50 ou 100 mg/cm³ ([3], voir figure 2).

Pour conclure, une expérience de laboratoire est représentative d'un phénomène astrophysique si de fortes contraintes (*lois d'échelle*) sont vérifiées. Nous les avons étudiées et, à notre connaissance, c'est la première fois que la pertinence de l'AL pour l'astrophysique est démontrée aussi rigoureusement [5].

Références

[1] J. FOURIER, "Théorie Analytique de la Chaleur", 1822, réédition J. Gabay (2001).

[2] E. BERTHIER, S. BOUQUET, J.-P. CHIEZE, R. TEYSSIER, "L'Astrophysique en Laboratoire : utilisation des lasers de forte Energie", *Clefs CEA*, **41**, p. 37-38 (1999).

[3] B. LOUPIAS et al., "Supersonic-Jet Experiments Using a High-Energy Laser", *Phys. Rev. Lett.*, **99** (26), 265001-1-4 (2007).

[4] C. D. GREGORY *et al.*, "Astrophysical Jets Experiments", *Plasma Phys. Control. Fusion*, **50**, p. 124039-1-7 (2008).

[5] E. FALIZE, S. BOUQUET, C. MICHAUT, "Radiation Hydrodynamics Scaling Laws in High Energy Density Physics and Laboratory Astrophysics", *J. Phys. Conf. Ser.*, **112**, p. 042016-1-4 (2008).



a interaction des faisceaux laser avec le piston.

b ablation du piston et propagation d'un choc dans la mousse.

c éjection d'un jet de plasma en face arrière après débouché de choc.

INTERRCTION D'UN LIET DE PLASITIR SUPERSONIQUE RVEC UN GRZ

P. NICOLAI, V. TIKHONCHUK, C. STENZ, X. RIBEYRE CENTRE LASERS INTENSES ET APPLICATIONS (CELIA), UMR 5107 UNIVERSITE DE BORDEAUX 1, CNRS ET CEA - CESTA

L'interaction d'un jet de plasma supersonique avec différents gaz à des pressions variées a été étudiée expérimentalement, analysée et interprétée numériquement. En changeant la nature du gaz, nous avons obtenu des évolutions quasi adiabatiques ou, au contraire, fortement dépendantes du refroidissement radiatif. Les structures obtenues sont similaires à celles observées dans certains objets astrophysiques à l'image des chocs courbes se propageant dans les gaz moléculaires, les matériaux sous choc, les discontinuités de contact et les disques de Mach.

Certaines expériences de laboratoire peuvent lever des hypothèses relevant de l'astrophysique. Par exemple, la création, la propagation et l'interaction de jets issus d'étoiles naissantes avec des gaz moléculaires demeurent des sujets de recherches actives, qui peuvent également être abordés au moyen de lasers de puissance [1].

Les plasmas de laboratoire et les objets astrophysiques ont des échelles de temps, d'espace et de densité très différentes. Cependant, certaines grandeurs caractéristiques, comme les vitesses des fluides ou des chocs, certains paramètres adimensionnés comme les taux de refroidissement ou le nombre de *Mach* peuvent être rendus comparables. Dans les expériences laser, des critères de similitude sont utilisés pour extrapoler les résultats obtenus en laboratoire aux conditions d'objets astrophysiques [2].

Dans l'expérience décrite dans cet article, nous utilisons une méthode de formation de jet [3] qui permet d'obtenir des vitesses d'environ 400 km/s à partir d'une énergie laser inférieure à 100 J. Nous avons fait interagir ces jets, longs de plusieurs mm, avec différents gaz placés en face d'eux. En jouant sur la nature du gaz et sa pression, nous avons obtenu des structures dans la zone d'inter-



Figure 1

Dispositif expérimental et alignement des diagnostics.

action couvrant toute une gamme de conditions, de quasi adiabatiques à fortement refroidies par rayonnement. Ces structures ont été analysées et reproduites au moyen d'un code bidimensionnel d'hydrodynamique radiative [4].

Dispositif expérimental et résultats

L'expérience a eu lieu sur l'installation PALS (Prague Asterix Laser System) à Prague (République Tchèque). Un faisceau laser, opérant à la longueur d'onde de 438 nm, d'énergie ~ 100 | et de 250 ps en durée (FWHM), a été focalisé dans une tache de 300 µm de rayon sur une plaque de cuivre. Une colonne de gaz de 3 mm de diamètre a été placée en face de la plaque. Le dispositif expérimental est présenté sur la figure 1. Deux diagnostics principaux ont été utilisés dans les domaines visible (438 nm) et X, pour caractériser les structures de la zone d'interaction. La figure 2 présente des ombroscopies et des images X (gamme 100 – 900 eV) typiques, obtenues avec des gaz d'argon et d'hélium. Nous pouvons clairement identifier différentes structures : la trace du laser dans le gaz (argon) par effet d'ionisation, le choc courbe qui se propage dans le gaz non perturbé, le gaz sous choc, le disque de Mach et le jet de cuivre lui-même.

Analyse des résultats et lien avec des objets astrophysiques

Dans le cas de l'argon, nous observons une bonne correspondance entre les ombroscopies et les images X. En effet, l'argon et le cuivre sont de bons émetteurs X et les structures de densité données par l'image visible réapparaissent dans l'image X. Par contre, dans le cas de l'interaction du jet avec un gaz d'hélium, le choc courbe et le gaz sous choc n'apparaissent pas dans l'image X. Nous avons comparé l'évolution au cours du temps de la zone d'interaction à des estimations analytiques et aux résultats du code hydroradiatif. Dans le cas de l'hélium, les pertes radiatives sont faibles, le plasma à l'arrière du choc demeure chaud et faiblement comprimé. La zone d'interaction est large (~1 mm) et suit une évolution adiabatique. Au contraire, dans le cas de l'argon, les pertes radiatives induisent une baisse de la température et conduisent à la formation d'une coquille dense et fine. Ce comportement est caractéristique d'une évolution non adiabatique. Par ailleurs, une analyse dimensionnelle montre qu'à partir d'un changement d'échelle, les résultats précédents peuvent être extrapolés aux jets produits par des jeunes étoiles [5]. La vitesse, le nombre de Mach, le rapport de densité jet sur gaz et les processus dissipatifs sont comparables dans les deux systèmes. De plus, si les temps d'évolution hydrodynamiques et les temps de refroidissement semblent incompatibles (de quelques nanosecondes à quelques siècles), leur rapport peut être réglé dans l'expérience, en jouant sur la composition du gaz et sa pression, et devenir identique pour les deux systèmes.

Conclusion

Jet de cuivre

2 mm

L'astrophysique de laboratoire ne nécessite pas obligatoirement l'utilisation d'installations laser multi-kilojoules. Au moyen d'un seul faisceau laser de 100 J et d'un jet de gaz, nous avons pu aborder l'étude de l'interaction

Ar

10 bars

de jets provenant d'étoiles naissantes avec des gaz interstellaires. Nous avons pu ainsi confirmer la nature hydrodynamique de ces jets et mis en évidence l'effet du refroidissement radiatif dans la zone d'interaction du jet avec le gaz moléculaire. Dans l'expérience de laboratoire, un simple changement de gaz et de pression a permis de modifier l'adiabaticité du système, et ainsi de couvrir l'ensemble du domaine d'étude. Enfin, tous les résultats expérimentaux ont été reproduits par nos outils de simulation.

Références

 B. A. REMINGTON, R. P. DRAKE, D. D. RYUTOV, "Experimental astrophysics with high power lasers and Z pinches", *Rev. Mod. Phys.* **78** (3), p. 755-807 (2006)
 D. RYUTOV, R. P. DRAKE, J. KANE, E. LIANG, B. A. REMINGTON, W. M. WOOD-VASEY, "Similarity Criteria for the Laboratory Simulation of Supernova Hydrodynamics", *Astrophys. J.*, **518**, p. 821-832 (1999).
 P. NICOLAI *et al.*, "Plasma jets produced in a single laser beam interaction with a planar target", *Phys. Plasmas*, **13**, 062701 (2006)

[4] P. H. MAIRE *et al.*, "A cell-centered lagrangian scheme for 2-dimensional compressible flow problems", SIAM, *J. Sci. Comput.*, **29**, 1781 (2007)

[5] P. NICOLAI *et al.*, "Studies of supersonic, radiative plasma jet interaction with gases", Phys. *Plasmas*, **15**, 082701 (2008)



Jet de cuivre

Figure 2

20 bars

Ombroscopies obtenues à différents instants :

- (a) à 7 ns pour un gaz d'argon à une pression de 10 bars.
- (b) à 10 ns pour un gaz d'hélium à une pression de 20 bars.

Images X obtenues dans les mêmes conditions :

(c) pour le gaz d'argon.

(d) pour le gaz d'hélium.

Sources X créées par laser : du multi-kev au multi-mev

M. PRIMOUT, A. COMPANT LA FONTAINE, C. COURTOIS, F. GIRARD, L. JACQUET, E. LEFEBVRE, P. RENAUDIN, B. VILLETTE CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE

Pour les besoins de ses programmes, le CEA-DAM développe des sources de rayonnement X couvrant une large plage d'énergie de photons, du keV au multi-MeV, en privilégiant, selon les applications, la monochromaticité, la brièveté, l'intensité ou la faible taille des sources. Celles-ci peuvent être utilisées pour des expériences de radiographie, de diffusion ou de diffraction sur différents types de cibles, depuis des matériaux choqués par explosif jusqu'aux cibles plasma du futur Laser Mégajoule. Plusieurs schémas de cibles sont à l'étude, reposant soit sur le rayonnement émis dans une cible de conversion par un faisceau d'électrons énergétiques, soit sur l'émission thermique d'un plasma chauffé.

Sources X en impulsions picosecondes

Le rayonnement X multi-MeV est produit dans le premier type de sources par des électrons relativistes subissant de multiples collisions dans une cible de conversion. Ces électrons sont produits par l'interaction d'une impulsion laser brève et intense, soit directement avec la cible, soit dans un jet de gaz placé juste devant celle-ci. Ce dernier schéma produit des doses X plus élevées et un lobe d'émission plus directif, mais il est aussi plus délicat à maîtriser expérimentalement. Entre ces deux extrêmes, les conditions d'interaction du schéma "cible solide" peuvent aussi être modifiées en créant un pré-plasma sur la face avant de la cible à l'aide d'un faisceau laser de chauffage. Les codes d'interaction laser-plasma CALDER et de transport de particules MCNP ont été couplés pour simuler de façon complète une telle configuration. Pour une faible extension du pré-plasma, nous observons une augmentation de l'ouverture angulaire du lobe d'émission électronique et des variations aléatoires de son pointé. Ces effets sont attribués à une forte filamentation du faisceau laser dans le pré-plasma dense. En augmentant le délai entre le faisceau de chauffage et le faisceau d'interaction,





Figure 1

- a Spectres d'émission X (simulés et mesurés) obtenus sur cible solide pour différentes longueurs de plasma et sur jet de gaz.
- **b** Image reconstruite de la source X obtenue par imagerie de pénombre.

ce dernier finit toutefois par rencontrer un pré-plasma sous-critique dans lequel la filamentation diminue et l'absorption augmente. En accord avec ces calculs, nous avons ainsi observé lors d'expériences sur le laser Alisé du CEA-CESTA que la dose X et la « dureté » du spectre d'émission (*figure 1a*) sont d'autant plus élevées que le pré-plasma est long [1]. La figure 1b montre une image déconvoluée de la source X mesurée par imagerie de pénombre. Ses faibles dimensions, inférieures à 200 µm, rendent ces sources X multi-MeV potentiellement intéressantes pour des applications de radiographie qui nécessitent de bonnes résolutions spatiale et temporelle.

Un schéma expérimental similaire permet de générer des sources X multi-keV utiles pour caractériser les propriétés spectrales des plasmas denses [2], via des mesures de

Pour des cavités tapissées de titane (figure 2), les valeurs maximales de rendement X entre 4 et 6 keV mesurées expérimentalement s'élèvent à 17,6 % [4], ce qui est nettement plus élevé que les meilleurs rendements obtenus avec les feuilles minces explosées. Ceci peut être attribué à l'effet de confinement à la fois hydrodynamique et radiatif du plasma métallique, lié à la géométrie de cavité. Pour des cavités tapissées de germanium, les meilleurs taux de conversion mesurés entre 9 et 13 keV sont de l'ordre de 1 %, soit légèrement inférieurs aux valeurs optimales obtenues avec des feuilles minces. Ces expériences ont fait l'objet d'un travail d'interprétation effectué avec le code hydroradiatif 2D FCI2. Pour les sources de titane, les taux de conversion calculés sont nettement inférieurs aux mesures. Les causes possibles de ce désaccord sont en cours d'exploration.



a Schéma d'irradiation d'une cavité tapissée de titane.
b Image sténopé intégrée en temps de la même cavité cylindrique dans le domaine X durs.

spectroscopie d'absorption. L'émission X est cette fois d'origine thermique et provient du plasma chauffé en volume dans la cible par les électrons relativistes issus de la zone d'interaction laser-matière. Les résultats d'une expérience réalisée au LULI (Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses) en collaboration avec des équipes du LULI et du CELIA ont permis d'utiliser les caractéristiques du rayonnement multi-keV produit pour remonter aux propriétés thermodynamiques du plasma émetteur. Ces données permettent de tester la validité de certaines hypothèses liées à la propagation des électrons et à leur couplage avec la cible solide.

Sources X multi-keV en impulsions nanosecondes

Après plusieurs expériences sur l'émission de feuilles minces métalliques [3], nos travaux sur les sources X multi-keV produites à l'aide d'impulsions laser kJ/ns se sont orientés vers l'étude de sources en cavités cylindriques tapissées de métal sur leur face interne. Plusieurs campagnes expérimentales ont été conduites sur le laser Omega (*États-Unis*) pour tester ces géométries et étudier l'influence sur le rendement de conversion X des dimensions de la cavité, de la forme et de la puissance de la loi d'irradiation laser ainsi que la nature du métal utilisé.



Perspectives

Les études présentées ci-dessus se poursuivront en 2009 sur les différentes installations auxquelles le CEA-DAM a accès – Alisé, LULI, Omega, Gekko XII – [5]. Elles nous permettront de poursuivre nos progrès tant dans la maîtrise expérimentale que dans la compréhension du fonctionnement des sources X créées par laser.

Références

[1] C. COURTOIS *et al.*, "Effect of plasma density scale length on the properties of Bremsstrahlung x-ray sources created by picosecond laser pulses", *Phys. Plasmas*, **16**, 013105 (2009).

[2] P. RENAUDIN *et al.*, "Spectroscopie d'absorption picoseconde d'un plasma produit par un laser intense ultrabref", *Chocs*, **36**, p. 68-77 (2008).

[3] D. BABONNEAU *et al.*, "Efficient multi-keV X-ray sources from laser-exploded metallic foils", *Phys. Plasmas*, **15**, 92702 (2008).

[4] M. PRIMOUT *et al.*, "Recent progress in metal-lined cylindrical hohlraum as efficient multi-keV X-ray sources", *J. Phys.: Conf. Ser.*, **112**, 042051 (2008).

[5] M. TANABE *et al.*, "Titanium dioxide nanofiber-cotton targets for efficient multi-keV x-ray generation", *Appl. Phys. Lett.*, **93**, 051505 (2008).

UN NOUVERU PROCÉDÉ D'ALLUITIRGE POUR LA FUSION INERTIELLE PAR LASER

G. SCHURTZ, X. RIBEYRE, M. LAFON CENTRE LASERS INTENSES ET APPLICATIONS (CELIA), UMR 5107 UNIVERSITE DE BORDEAUX 1, CNRS ET CEA - CESTA

> Parmi les différentes voies qui sont suivies dans le but d'obtenir la fusion thermonucléaire par confinement inertiel (FCI), celle de l'allumage par chocs est particulièrement bien adaptée aux exigences d'un futur réacteur. Cette approche est développée au laboratoire CELIA, avec des premiers résultats prometteurs.

La recherche dans le domaine de la FCI est motivée par des objectifs propres à la Défense, mais aussi par le projet de produire un jour de l'électricité d'origine thermonucléaire à l'échelle industrielle. Au-delà de la démonstration prochaine de gains thermonucléaires de plusieurs dizaines d'unités par les installations NIF (États-Unis) et LMJ (France), la communauté scientifique vise à présent à définir ce que serait un futur réacteur expérimental. L'exigence de hauts gains, obtenus à des cadences de tir de quelques Hz, conduit à privilégier la compression du combustible par irradiation directe (par opposition à l'attaque indirecte où on utilise le rayonnement thermique produit dans une cavité). Or, l'attaque directe supporte mal les vitesses d'implosion élevées indispensables à l'allumage spontané par point chaud central. La mise au point de procédés d'allumage de cibles implosées à basse vitesse est donc essentielle pour la faisabilité de la fusion inertielle pour l'énergie. L'allumage rapide au moyen d'un laser de classe Petawatt [1] est un de ces procédés. Un schéma alternatif d'allumage purement hydrodynamique est actuellement considéré comme également prometteur : c'est l'allumage par chocs, proposé par Betti et al. [2].



Figure 1

Mise en forme temporelle de l'impulsion laser requise pour l'allumage par choc.

Principe de l'allumage par chocs

Une cible implosée à basse vitesse est stable, mais ne s'allume pas spontanément, faute d'une pression suffisante en son centre en fin de compression. Un moyen d'augmenter sélectivement la pression au point chaud est de lancer un choc convergent dans la cible, peu avant l'instant de stagnation. En effet, la pression d'un tel choc augmente à mesure qu'il converge, pratiquement de manière inversement proportionnelle au rayon. Lorsque le choc convergent entre en collision avec le choc divergent qui résulte de la stagnation des couches centrales, la pression s'accroit brutalement, jusqu'à un facteur 6 dans les conditions optimales. Cette surpression est transmise au point chaud et porte ce dernier aux conditions d'allumage. L'impulsion laser qui engendre un tel choc doit comporter un pic final de forte puissance (figure 1).

Allumage par chocs à basse énergie : la cible de base du projet HiPER

Le projet européen HiPER (High Power laser Energy Research facility) a pour objet de démontrer la faisabilité de la fusion inertielle pour l'énergie. Il s'articule autour d'une cible de base, constituée de 0,6 mg d'un mélange équimolaire de deutérium-tritium (DT) et implosée au moyen d'une impulsion laser nanoseconde de 180 kJ [3]. Nous avons réalisé une série de simulations hydroradiatives d'implosion et d'allumage de cette cible en faisant varier la puissance et l'instant d'envoi du choc. Les résultats de cette étude sont présentés sur la figure 2, où nous pouvons observer que l'allumage se produit à partir d'une puissance laser absorbée de 50 TW, sous réserve d'une parfaite chronométrie. À mesure que la puissance transmise à la cible augmente, l'intervalle temporel à l'intérieur duquel l'impulsion d'allumage peut être déclenchée s'élargit. Pour 80 TW absorbés (160 TW, 64 kJ incidents), nous constatons qu'une énergie thermonucléaire supérieure à 18 MJ est obtenue pour une fenêtre temporelle large de 250 ps. Dans ce cas, l'énergie laser totale est 244 kJ, ce qui porte le gain de cette cible à 80.



Figure 2



Différents effets limitatifs, comme les instabilités de rétrodiffusion et la production d'électrons suprathermiques, ont été analysés, et ne semblent pas présenter de risque majeur [4]. En particulier, le gain de cible apparaît peu sensible aux défauts d'uniformité du pic d'allumage, y compris dans le cas limite d'une irradiation bipolaire. Par ailleurs, l'instabilité de *Rayleigh-Taylor* qui se développe à la stagnation est remarquablement modérée par le choc, dont le transit à l'interface du point chaud provoque une inversion partielle des perturbations. La simulation perturbée présentée sur la figure 3 prédit un rendement thermonucléaire identique à celle du cas parfaitement symétrique.

Ces premières études soulignent les potentialités du procédé d'allumage par chocs. Ce procédé permet d'espérer des gains élevés avec une sécurité hydrodynamique accrue. Il est singulièrement tolérant à l'instabilité de *Rayleigh-Taylor* au point chaud et s'accommode de conditions d'irradiations peu symétriques. La base physique de l'allumage par choc est l'hydrodynamique induite par laser, domaine pour lequel la communauté scientifique dispose de codes validés. Les cibles allumées par choc sont simples, et, par comparaison aux cibles d'attaque indirecte ou aux cibles d'allumage rapide avec cône de conversion, bien mieux adaptées à une production en masse et à une injection cadencée en chambre d'expérience, ce qui est un atout essentiel pour *HiPER*.

Références

 M. TABAK *et al.*, "Ignition and high gain with ultrapowerful lasers", *Phys. Plasmas*, **1**, p. 1626-1634 (1994).
 R. BETTI *et al.*, "Shock Ignition of Thermonuclear Fuel with High Areal Density", *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 155001 (2007).

[3] S. ARZENI *et al.*, "Targets for direct-drive fast ignition at total laser energy of 200–400 kJ", *Phys. Plasmas*, **14**, 052702 (2007).

[4] X. RIBEYRE *et al.*, "Shock ignition: an alternative scheme for *HiPER*", *Plasmas Phys. Control. Fusion*, **51**, 015013 (2009).



Figure 3

Iso-densité du combustible ($g.cm^3$) lors de la stagnation, pour une implosion perturbée selon le mode de Legendre l = 12 (code CHIC – CELIA).

a Sans choc d'allumage, la compression du point chaud est fortement dégradée sous l'effet de l'instabilité de *Rayleigh-Taylor*.
b Assemblage final de la même cible soumise à un choc d'allumage.

UNE CRVITÉ EN FORTTE DE BRULON DE RUGBY POUR LE LITTU

M. VANDENBOOMGAERDE, J. BASTIAN, A. CASNER, D. GALMICHE, J.-P. JADAUD, S. LAFITTE, S. LIBERATORE, G. MALINIE, F. PHILIPPE CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE

Lors de la montée en puissance du Laser MegaJoule (LMJ), l'activation des 160 premiers faisceaux laser permettra de réaliser des expériences d'ignition. Ces expériences seront contraintes par une puissance laser et une symétrie d'irradiation du microballon fusible réduites par rapport au schéma à 240 faisceaux.

Depuis 2002, nous utilisons une nouvelle géométrie de cavité en forme de ballon de rugby sur l'installation laser Omega (États-Unis). Des codes de simulation et des modèles montrent, qu'à l'échelle du LMJ, cette cavité présente des avantages par rapport à une cavité classique : elle permet de maintenir une bonne irradiation et réduit l'énergie laser à investir.

L'approche classique de fusion par confinement inertiel (*FCI*) en attaque indirecte consiste à placer un microballon de deutérium-tritium (*DT*) au centre d'une cavité cylindrique dont les parois convertissent l'énergie laser en rayonnement X. Ce dernier ablate le microballon qui, en réaction, se comprime. Si cette compression est sphérique et importante, la densité et la température au cœur du DT sont telles que des réactions de fusion se déclenchent.

Énergie et symétrie d'éclairement

Dans sa configuration de référence, le LMJ comptera 240 faisceaux regroupés en 2x3 cônes créant 3 anneaux d'irradiation par demi-cavité. L'intensité du rayonnement X et l'uniformité d'éclairement du microballon via les 3 anneaux permettront une implosion menant à la fusion. Lors de l'étape de construction du LMJ à 160 faisceaux, 1/3 de l'énergie laser manquera et le contrôle de l'éclairement ne sera plus réalisé que par deux anneaux, ce qui rendra plus difficile l'atteinte de l'ignition.

En s'appuyant sur des simulations numériques réalisées avec le code FCI2, un bilan énergétique de cavité a été établi : il relie les variations d'énergie laser E_L et de géométrie de la cavité (*caractérisée par la surface des parois, A_w, son volume, V, et la surface des trous d'entrée laser – TEL –, A_{tel}*) à l'énergie cinétique du microballon, E_c :

$$\frac{1}{8}\frac{\Delta E_c}{E_c} = \frac{\Delta E_L}{E_L} - \frac{1}{2}\frac{\Delta A_w}{A_w} - \frac{1}{8}\frac{\Delta V}{V} - \frac{1}{4}\frac{\Delta A_{tel}}{A_{tel}}$$
(1)



Coupe d'un quart de cavité :

a Cavités cylindrique et rugby de longueurs respectives L_{cyl} et L_{ruq} .





À dimensions comparables, le passage d'une cavité cylindrique à une cavité rugby (*figure 1 a*) permet une réduction de la surface des parois et du volume [1]. De plus, pour un même angle θ_{cap} sous lequel le microballon voit l'anneau des taches laser, la longueur *L* de la cavité peut encore être réduite. Enfin, le passage de seulement deux cônes laser autorise des TEL plus petits, d'où une diminution de A_{tel}. La cavité rugby minimise donc les pertes ce qui, à énergie laser réduite, aide à maintenir l'énergie cinétique du microballon (*Eq.* (1)).

Pour que l'implosion soit sphérique, le rayonnement X issu de la cavité doit éclairer uniformément le microballon. Or, les TEL constituent des zones "froides", non irradiantes, au sein de la cavité. Une configuration à 3 cônes rétablit l'uniformité en plaçant deux anneaux d'irradiation près du TEL. Avec seulement 2 cônes, la symétrie d'irradiation est dégradée. La courbure de la cavité rugby a, cependant, deux effets : pour un même angle θ_{cap} , elle rapproche l'anneau proche du TEL et tourne son émission X vers le microballon (*figure 1b*). Ces deux effets augmentent l'importance de l'anneau externe, ce qui rétablit la symétrie d'éclairement. Le code de facteurs de forme FACTRI a vérifié ce résultat [1].

Cavité rugby : présent et futur

Des cavités rugby sont déjà utilisées avec succès sur l'installation Omega pour réaliser des expériences d'implosion et d'instabilités hydrodynamiques [1], [2], [3], [4]. Comme le montre l'équation (1), l'avantage énergétique des cavités rugby est d'autant plus important que leurs dimensions sont grandes. Des simulations LMJ impliquant 160 faisceaux, 2 cônes et une cavité rugby ont été effectuées (*figure 2a*) en variant l'énergie laser via la puissance maximale de l'impulsion, P_{max} . Les résultats ont été comparés à une configuration à 240 faisceaux, 3 cônes et utilisant une cavité cylindrique [5]. Le microballon est le même dans les deux cas.

Cavité R 0,2 H_2-He 0,0 0,0 0,1 0,2 0,3 0,4 0,5 0,6 Z

Figure 2

a Cavité rugby LMJ avant (*partie gauche*) et pendant le calcul (*partie droite*).

Bien qu'il n'y ait que 2 cônes laser, le microballon implose correctement et, au-delà d'un seuil de P_{max} , donne l'énergie de fusion de 30 MJ obtenue à l'aide de 240 faisceaux. Pour retrouver la même énergie cinétique E_c , une puissance P_{max} de 315 TW est nécessaire ; ceci correspond à une énergie laser de 1,04 MJ contre 1,4 MJ pour le LMJ nominal avec une cavité cylindrique. Le gain sur l'énergie laser totale est donc de 24 %.

En conclusion, le concept de cavité "rugby", aidé d'une optimisation du microballon et de nouveaux matériaux de paroi, constitue un atout majeur pour l'ignition avec 160 faisceaux.

Références

[1] M. VANDENBOOMGAERDE, J. BASTIAN, A. CASNER, D. GALMICHE, J.-P. JADAUD, S. LAFFITE, S. LIBERATORE, G. MALINIÉ, F. PHILIPPE, "Prolate spheroid ("rugby-shaped") hohlraum for inertial confinement fusion", *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 065004 (2007).

[2] A. CASNER, G. HUSER, J.-P. JADAUD, S. LIBERATORE, D. GALMICHE, M. VANDENBOOMGAERDE, "Planar Rayleigh-Taylor and feedthrough experiments with CH(Ge) on Omega", J. Phys IV France, **133**, p. 163-166 (2006).

[3] M. VANDENBOOMGAERDE, S. LIBERATORE, D. GALMICHE, A. CASNER, G. HUSER, J.- P. JADAUD, B. VILLETTE, "Planar hydrodynamics instability computations and experiments with rugby-shaped hohlraums at the Omega Laser", *J. Phys. Conf. Series*, **112**, 022019 (2008).
[4] A. CASNER, D. GALMICHE, G. HUSER, J.-P. JADAUD, S. LIBERATORE, M. VANDENBOOMGAERDE, "Indirect drive ablative Rayleigh-Taylor experiments with rugby hohlraum on Omega", soumis à publication dans *Physics of Plasmas* (2009).

[5] S. LAFFITE *et al.*, "Numerical study for the LMJ target 2D design", Proc. 2d Inertial Fusion Sciences and Applications (IFSA), édité par K. A. Tanaka *et al.* (Kyoto, Japan), p. 227-230 (2001).





DURCISSEMENT DES DIRGNOSTICS DU LIMU EN ENVIRONNEMENT SÉVÈRE

J.-L. BOURGADE*, R. MARMORET*, J.-Y. BOUTIN*, J. BAGGIO**, J.-C. GOMME**, H.-P. JACQUET*, J.-P. JADAUD*, J.-L. LERAY***, J. RAIMBOURG*, D. AUBERT* *CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE, ** CEA – CESTA, ***CEA – CABINET DU HAUT COMMISSAIRE

Dès la phase de conception du LMJ en 1993, la prise en compte de la vulnérabilité des diagnostics plasma qui seront fortement irradiés lors des expériences de fusion a été au cœur de notre démarche de conception. Des salles blindées, réalisées dans le bâtiment LMJ à proximité du plasma et n'ayant pas d'équivalent sur l'installation NIF (National Ignition Facility, USA), ainsi que des études de déport et de protections spécifiques, permettront d'effectuer des mesures directes sur les premiers plasmas thermonucléaires.



Introduction des menaces

Le Laser Mégajoule *(LMJ)* [1] est une installation laser du CEA-DAM prévue pour démontrer la possibilité d'obtenir, en laboratoire, un gain thermonucléaire en brûlant un mélange de deutérium et de tritium à l'aide du principe de fusion par confinement inertiel. La fusion devrait produire jusqu'à 6.10¹⁸ neutrons de 14 MeV en 100 ps, qu'un premier blindage *(S0 cm de béton boré à la surface de la chambre d'expérience)* permettra d'absorber en partie *(72 %)*. Un mélange de neutrons diffusés

et de rayons γ se répandra rapidement (~300 ns) dans tout le hall d'expérience (*HE*) du LMJ, comme cela a été démontré par une modélisation de type Monte-Carlo de leur parcours. Les diagnostics plasma, placés au plus proche de la source pour des besoins de résolutions, doivent néanmoins pouvoir continuer à être opérationnels sous ces forts débits de dose de radiations nucléaires. En l'absence de prise en compte de ces perturbations, tous les détecteurs actuels seraient rendus inaptes à la mesure [2]. Même pour des tirs où la production neutronique serait plus faible, les émissions de rayons X "mous" (< 3 keV)



génèreront des chocs violents sur tous les matériaux trop proches (< 50 cm) du plasma, et ceux plus "durs" (> 30 keV) induiront un bruit de fond sur tous les détecteurs placés dans un système d'insertion de diagnostics (SID) interne à la chambre. À ces rayonnements se superposera, partout dans le HE, une forte impulsion électromagnétique (IEM) créant des courants transitoires qui, transmis par les câbles, sont susceptibles d'endommager les électroniques. Enfin, les édifices des cibles du LMJ produiront des éclats, pouvant détériorer gravement les parties les plus vulnérables des diagnostics.

Le durcissement

La diversité et l'étendue des menaces potentielles nécessitent une défense multiple et étagée [3]. Des structures de blindage, uniques pour certaines, ont été intégrées au bâtiment du LMJ et à ses infrastructures (*figure 1*) :

- 8 casemates (comportant 3 à 4 étages de 15 m²) ont été construites à seulement une dizaine de mètres des diagnostics plasma principaux. Adossées en première zone du HE (dont le diamètre est de 33 m), leurs murs sont suffisamment épais (50 cm de béton) pour limiter les radiations à l'intérieur, jusqu'à une émission de 5.10¹⁶ neutrons ;
- Pour les tirs à gain, d'autres salles (voir ET4 et ET5 sur la figure 1), comme celle dédiée aux mesures de radiochimie (RC) et situées au-delà du mur de protection biologique de 2 m d'épaisseur, offrent des centaines de mètres carrés pour une distance accrue de 30 à 50 m. Les bases de vol dites "allongées" (BVA) et la salle "à bas bruit de fond" (SBBF) sont dédiées principalement aux mesures neutroniques ;
- Les infrastructures entourant la chambre d'expérience ont été conçues pour supporter des blindages additionnels (*jusqu'à 28 tonnes*) afin de protéger les électroniques non durcies qui doivent être conservées à proximité des détecteurs.

Par ailleurs, les analyseurs optiques (AO) transforment les rayons X en images visibles, permettant leur transport optique sur de plus grandes distances, à condition toutefois d'effectuer ce transfert avant que l'intense bouffée de rayonnement γ émise 100 ns après l'instant de combustion thermonucléaire (lorsque les neutrons produits sont absorbés dans la protection neutronique) ne les atteigne. En 2008, en collaboration avec l'institut d'optique d'Orsay, nous avons démontré théoriquement la faisabilité d'un système de transport optique d'images de type périscopique (schéma représenté sur la figure 2) sur quelques dizaines de mètres, entre l'écran de sortie d'un AO et un détecteur d'image placé dans une casemate. Ce système est capable de conserver les résolutions spatiales recherchées (10 pl/mm) et d'être suffisamment ouvert (F/4) pour s'adapter au faible niveau lumineux disponible. Nous avons aussi calculé les niveaux d'agression des électroniques des AO embarqués dans un SID, et étudié la possibilité de les protéger des rayons X les plus pénétrants par un blindage de quelques mm d'épaisseur en matériaux lourds. Notre choix exclusif d'utilisation d'optiques X rasantes offre la possibilité de compléter cette protection, en plaçant un blindage épais sur la vue directe du détecteur, tout en laissant libre le chemin optique. Enfin, pour limiter les effets des éclats générés lors d'un tir, les 4 premiers diagnostics du LMJ intégreront un ensemble de filtres de protection amovibles, permettant d'effectuer une campagne expérimentale d'environ 15 tirs successifs sans une maintenance lourde en boite à gants.

Prise en compte dès le début du projet, la problématique de la vulnérabilité est donc aujourd'hui totalement intégrée à la conception actuelle des futurs diagnostics du LMJ.

Références

[1] N. FLEUROT, C. CAVAILLER, J.L. BOURGADE, "The Laser Mégajoule project dedicated to inertial confinement fusion : Development and construction status", *Fusion Eng. Des.*, **74**, p. 147-154 (2005).

[2] J.-L. BOURGADE *et al.*, "New constraints for plasma diagnostics development due to the harsh environment of MJ class lasers", *Rev. Sci. Instrum.*, **75**, p. 4204-4212 (2004).

[3] J.-L. BOURGADE, R. MARMORET *et al.*, "Diagnostics hardening for harsh environment in Laser Mégajoule", *Rev. Sci. Instrum.*, **79**, 10F301 (2008)



DÉFINITION D'UN RÉSERU DE COMPRESSION D'IMPULSIONS TOUT SILICE

N. BONOD*, J. NEAUPORT** *INSTITUT FRESNEL CNRS UMR 6133 MARSEILLE, **CEA CESTA

Un réseau de diffraction pour la compression d'impulsions ultrabrèves est gravé sur un cristal photonique bi-dimensionnel composé de trous d'air à sections carrées dans une matrice de silice. La réflexion du faisceau incident est basée sur le contraste des indices de l'air et de la silice. Ce composant optique permet l'utilisation unique de silice, matériau solide qui présente un seuil d'endommagement laser élevé dans le régime femtoseconde.

Les réseaux de diffraction sont utilisés dans la compression d'impulsions ultra-courtes laser amplifiées par la méthode dite de "dérive de fréquences" [1]. Ces réseaux doivent présenter une efficacité de diffraction importante afin de limiter les pertes d'énergie lors de la compression de l'impulsion, et un seuil d'endommagement élevé puisque le faisceau incident est amplifié. Des réseaux métalliques peuvent être utilisés mais, outre leur efficacité limitée à 90 %, ils présentent un seuil d'endommagement trop faible. Des réseaux entièrement diélectriques dits MLD (multi-layer dielectrics) sont donc apparus au milieu des années 1990. Ils ont permis d'augmenter significativement le seuil d'endommagement et d'obtenir des efficacités réfléchies mesurées proches de 96 % [2]. Ces réseaux de diffraction sont gravés sur un empilement diélectrique constitué d'une vingtaine de paires de dioxyde d'hafnium et de silice ; l'empilement diélectrique est optimisé pour présenter une réflectivité quasi parfaite (> 99,99 %) en polarisation transverse électrique (TE). La silice est un matériau de bas indice de réfraction (n = 1,45) qui présente une très bonne tenue au flux

(n = 1,45) qui presente une tres bonne tenue au flux laser. Nous présentons donc ici une étude numérique portant sur des cristaux photoniques bi-dimensionnels (2D), où des trous d'air sont réalisés dans une matrice de silice qui joue alors le rôle du matériau de haut indice, l'air jouant celui du bas indice. Ces cristaux évitent l'utilisation d'un matériau autre que la silice, et suppriment donc la présence d'interfaces entre deux matériaux solides. Le réseau est gravé sur le cristal photonique.

Ce travail s'inscrit dans l'élaboration de réseaux utilisés pour l'étage final de compression d'impulsions du projet PETAL [3]. La longueur d'onde est fixée à 1 053 nm, l'angle d'incidence à 77,2°, la polarisation est TE et la période est 562 nm selon l'axe Ox (figure 1). Les trous d'air dans la silice sont à section carrée et la périodicité air / silice est fixée à la moitié de la périodicité du réseau ; elle est suffisamment faible pour éviter la propagation d'ordres dispersifs. Suivant Oy, le cristal comporte un nombre fini de couches de trous espacées d'une distance Δ . Les calculs sont réalisés par un code numérique où le développement du champ électromagnétique sur



Figure 1

Cristal photonique bi-dimensionnel composé de silice (en gris, indice n = 1,45) et d'air (en blanc n = 1). Configuration retenue : trous d'air à sections carrées et maille rectangulaire. La période est d/2 suivant Ox et Δ est la distance entre chaque couche de trous suivant Oy. Le réseau est lamellaire de hauteur h, de largeur c, et de période d. une base de *Fourier* permet de réduire les équations de *Maxwell* à un système différentiel du premier ordre. L'intégration du champ, du substrat (*silice*) à l'air, permet d'évaluer les efficacités réfléchies et transmises de tous les ordres de diffraction.

Optimisation du cristal

La première étape de l'étude consiste à définir une géométrie du cristal photonique lui garantissant une réflectivité quasi parfaite. L'angle d'incidence est fixé à 70,9°, angle médian entre les deux angles de diffraction des ordres (-1) et (0) du réseau de diffraction, qui sera par la suite ajouté au cristal photonique. Nous calculons donc la réflectivité du cristal en fonction de la longueur des côtés *a* des trous d'air et de l'épaisseur résiduelle de silice entre deux couches de trous d'air Δ . Dix couches de trous d'air de côté 0,8*d*/2 permettent d'obtenir une réflectivité quasi parfaite (> 99,99 %) sur un large intervalle spectral de 200 nm et pour des angles d'incidence supérieurs à 60° [4].

Optimisation de la structure complète

Nous étudions l'efficacité en réflexion de la structure complète, incluant le réseau de diffraction, en fonction de la profondeur h et de la largeur c des sillons du réseau à une incidence de 77,2°. Les efficacités en réflexion obtenues dans l'ordre (-1) peuvent être numériquement très élevées dans des intervalles larges de h et c (figure 2).



Figure 2

Efficacité réfléchie de l'ordre (-1) en fonction de la hauteur h et de la largeur c des sillons pour 10 couches de trous d'air dans la silice.

Pour h = 500 nm et c = 340 nm, l'efficacité réfléchie dans l'ordre (-1) est supérieure à 99 % dans un intervalle d'incidence de 18°. La tolérance spectrale est alors comparable à celle obtenue avec les réseaux *MLD*. Bien que le cristal seul présente des performances largement supérieures, c'est le réseau ici qui impose les tolérances angulaires et spectrales. La répartition du champ électrique dans la partie supérieure du réseau, paramètre déterminant pour l'endommagement laser en impulsion courte [4], est similaire à celle observée avec les réseaux *MLD*.

Conclusion

Des réseaux uniquement composés de silice peuvent présenter des efficacités réfléchies dans l'ordre (-1) supérieures à 99,9 %. La réflectivité du cristal photonique, basée sur un contraste d'indices entre l'air et la silice, est quasi parfaite sur de larges intervalles spectraux et d'angles d'incidence. Ces intervalles sont partiellement réduits par l'ajout du réseau de diffraction. Cependant, les efficacités réfléchies restent élevées (\geq 99 %).

Références

[1] D. STRICKLAND, G. MOUROU, "Compression of amplified chirped optical pulses", *Opt. Commun.*, **56**, p. 219-221 (1985).

[2] M. D. PERRY *et al.*, "High efficiency multilayer dielectric diffraction gratings", *Opt. Lett.*, **20**, p. 940-942 (1995).

[3] N. BLANCHOT *et al.*, "Overview of PETAL, the multipetawatt project on the LIL facility", *Plasma Phys. Control. Fusion*, **50**, 124045 (2008).

[4] N. BONOD, J. NEAUPORT, "Design of a full silica pulse compression grating", *Opt. Lett.*, **35**(5), p. 458-460 (2008).

[5] J. NEAUPORT *et al.*, "Effect of electric field on laser induced damage threshold of multilayer dielectric gratings", *Opt. Express*, **19**, p. 12508-12522 (2007).

 $[\]Delta$ = 350 nm ; a = 0,8d/2 ; θ = 77,2° ; λ = 1 053 nm.

Ralentissettient de particules supratheritiques Dans un itilieu hétérogène aléatoire pour la fci

R. SENTIS*, J.-F. CLOUËT*, F. GOLSE**, M. PUEL*** *CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE,**ECOLE POLYTECHNIQUE, PALAISEAU,***UNIVERSITE P. SABATIER, TOULOUSE

Dans le cadre des plasmas de fusion par laser, on étudie un problème de ralentissement de particules chargées suprathermiques. Nous nous plaçons dans le cadre d'une géométrie aléatoire binaire composée de deux matériaux et nous cherchons à déterminer la fraction P de particules qui s'arrêtent dans un des matériaux.

Les problèmes de transport de particules dans des milieux hétérogènes sont bien connus dans le cas d'hétérogénéités périodiques, si le libre parcours moyen des particules est de taille comparable aux hétérogénéités. Dans le cas où le libre parcours moyen est beaucoup plus grand que la taille de ces dernières, ce problème a été étudié pour des hétérogénéités périodiques ou aléatoires [1]. La section efficace équivalente du milieu homogénéisé est alors la moyenne des sections efficaces pondérées par les volumes de chaque matériau.

100

Le problème traité ici est différent [2]. Dans le cadre de la fusion par confinement inertiel (FCI), il s'agit du transport et du ralentissement de particules de Tritium créées par la réaction de fusion $D + D \Rightarrow T + \text{proton}$. Ces particules sont dites suprathermiques car elles possèdent une vitesse grande devant la vitesse d'agitation thermique. Le milieu hétérogène est constitué d'un matériau léger (*le deutérium*) et d'un matériau dense (*une coquille en plastique*). Une question importante est alors de savoir où les particules suprathermiques s'arrêtent, leur arrêt dans le milieu léger étant susceptible de contribuer à de nouvelles réactions de fusion avec le deutérium.



Différentes modélisations existent, comme les mélanges binaires de type Poissonien (figure 1 **a**) ou encore les milieux de type Markovien (figure 1 **b**). Nous opérons donc de la façon suivante. Le matériau lourd *G* est supposé être une réunion de sphères S_q dont les centres **q** sont répartis selon un processus ponctuel de Poisson (*i.e. la probabilité* qu'il y ait n points dans un ensemble fermé A de volume |A|est égal à $(\lambda |A|)^n \exp(-\lambda |A|)/n!$).

Les sphères ont un rayon fixe r (celui-ci pourrait être aléatoire avec un certain écart-type) et peuvent se recouvrir. Le complémentaire de G, noté G^c , constitue le matériau léger. Nous notons f la fraction volumique du milieu G; en notant E l'espérance, nous avons pour tout A:

$$f = \frac{1}{|A|} \mathsf{E}(|A \cap G|) = 1 - \exp\left(-\lambda \frac{4\pi}{3}r^3\right).$$

Nous pouvons évaluer, dans ce cadre, la longueur moyenne d'une corde du milieu G [3]. Notons que si nous étions dans l'espace entier, le milieu aléatoire correspondant serait ergodique. En fait, nous considérons le problème sur un tore $[0, L[^3, où L \text{ est une distance caractéristique d'observation de façon à pouvoir réaliser des simulations numériques, et ne pas avoir de problèmes techniques de condition aux limites.$



Modèle de transport

La densité de particules au temps t, à la position x avec la vitesse de module w et de direction Ω est notée $u(t,x,w,\Omega)$. Nous supposons que ces particules sont ralenties en ligne droite, et que la fonction u satisfait l'équation de transport :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + w\Omega \frac{\partial u}{\partial x} - K(x)\frac{\partial u}{\partial w} = 0$$

où le paramètre d'arrêt K prend deux valeurs distinctes, selon que l'on est dans le milieu lourd (K = k) ou dans le milieu léger (K = m).

Nous supposons aussi que les particules sont créées uniformément dans le milieu léger. Le problème revient alors à déterminer la fraction P de particules qui s'arrêtent dans ce milieu léger, c'est à dire la quantité suivante :

$$P = \frac{1}{|G^c|} \iiint 1_{G^c}(x) u(t_{\max}, x, \Omega, w) \frac{d\Omega}{4\pi} dx dw$$

où t_{max} est un temps assez grand, tel que le module w soit nul. Nous avons donc quatre longueurs caractéristiques L, r, k^{-1} , m^{-1} . Ces deux dernières correspondent aux longueurs de ralentissement dans le milieu lourd et dans le milieu léger, respectivement, et sont supposées satisfaire $k^{-1} \leq m^{-1} \leq L$ et $m^{-1} \sim L$.

Dans [2], nous avons étudié d'une part le cas limite correspondant aux sphères petites devant la longueur de ralentissement du milieu lourd, c'est-à-dire r.k<<1. Cette configuration correspond à de l'homogénéisation. Nous trouvons alors une fonction analytique telle que :

$$P(f) \cong P_h(f) = \frac{m(1-f)}{m(1-f) + kf}$$

D'autre part, nous avons étudié le cas opposé, correspondant aux sphères du milieu lourd ayant un très fort pouvoir de ralentissement r.k>>1. Les particules ont alors une forte probabilité de s'arrêter dans la première sphère rencontrée et nous montrons que :

$$(f) \cong P_s(f) = \exp\left(\frac{3}{4mr}\log(1-f)\right)$$

Simulations numériques

Un très grand nombre de simulations numériques ont ensuite été réalisées dans des cas intermédiaires entre les deux configurations précédentes. Cela permet de proposer un "fit" entre les deux formules obtenues. Par une démarche empirico-numérique, nous avons pu finalement construire une approximation de P(f) qui est une combinaison linéaire des deux formules P_h et P_s en utilisant une fonction de rk. Elle peut être comparée avec celle proposée dans [4] obtenue avec l'hypothèse d'un milieu Markovien. Sur la figure 2, nous comparons notre formule, celle de [4] et les résultats obtenues par simulation numériques.

Conclusion

Avec une bonne caractérisation locale des grandeurs représentatives de la géométrie (*ici les quantités f, k, m et r*) et des techniques de "géométrie stochastique" [3], nous avons pu établir une formule approchée pour la quantité d'intérêt P(f), en utilisant des techniques asymptotiques et des simulations numériques fournissant un "raccord" entre les formulesthéoriques.

Références

[1] L. DUMAS, F. GOLSE, "Homogeneization of Transport Equations", *SIAM J. Appl. Math.*, **60**, p. 1447-1470, (2000).

[2] J.-F. CLOUET, F. GOLSE, M. PUEL, R. SENTIS, "On the slowing down of charged particles in a binary stochastic mixture", *Kinetics Rel. Models*, **1**, p. 387-404 (2008).

[3] D. STOYAN, W.S. KENDALL, J. MECKE, "Stochastic Geometry and applications", *Ed. John Wiley*, Chischester (1995).

[4] A. K. PRINJA, G. C. POMRANING, "On the propagation of a charged particle beam in a random medium. II: Discreate binary statistics", *Transport Theory Statist. Phys.*, **24**, p. 565-590 (1995).



Figure 2

Quantité P en fonction de f pour une certaine valeur des coefficients r, k, m: comparaison entre notre formule (courbe rouge), celle de [4] (courbe verte) et les résultats de simulations numériques (symboles +). Les positions des centres q sont tirées au hasard.

SCHÉTTIRS LAGRANGIENS ET MÉTHODES DE REMAILLAGE EN ÉNERGIE TOTALE

G. CARRÉ, S. DEL PINO, B. DESPRÉS, E. LABOURASSE CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE

Les équations de l'hydrodynamique compressible avec chocs modélisent une part importante des écoulements fluides. La simulation numérique de ce type d'écoulement a, de tout temps, stimulé de nouvelles études, tant au CEA-DAM que dans d'autres communautés pour lesquelles ces phénomènes sont importants (aéronautique). L'originalité des méthodes présentées dans cet article est qu'elles sont lagrangiennes, c'est-à-dire que le maillage est mobile pour suivre le déplacement du fluide. Cela présente des intérêts pratiques multiples au prix d'une complexité certaine. Ce n'est que très récemment, à partir d'un effort de recherche mathématique et numérique initié en 2000, qu'il a été possible d'utiliser les approches modernes (solveurs de Godunov) dans les méthodes lagrangiennes multidimensionnelles. Nous décrivons dans cet article une contribution récente et expliquons l'intérêt de cette approche pour la simulation numérique tridimensionnelle pour la fusion par confinement inertiel (FCI) en contexte ALE (Arbitrary Lagrange Euler) et AMR (Adaptive Mesh Refinement).

Méthodes lagrangiennes

La simulation numérique des écoulements compressibles tridimensionnels pour la FCI est très exigeante par nature. La connaissance du taux de compression de la matière fusible permet, si ce taux est calculé avec précision, de dimensionner les cibles. La méthode numérique classiquement utilisée trouve ses fondements dans les travaux originaux de Von Neumann. Elle est extrêmement efficace pour les écoulements purement lagrangiens avec un nombre de mailles raisonnable. En revanche, deux points durs subsistent pour toute méthode lagrangienne : le comportement à grand nombre de mailles (c'est le problème de la convergence numérique) et la compatibilité avec les techniques de remaillage, qu'il faut absolument mettre en œuvre pour des écoulements tourbillonnaires. Dans le cas où un remaillage est mis en œuvre, nous parlons de méthodes ALE. Les travaux de Godunov [1] ont levé en partie la difficulté en introduisant les méthodes numériques eulériennes en énergie totale : ces méthodes respectent par construction les lois physiques de conservation, ce qui garantit in fine une très bonne précision numérique après remaillage. Par exemple, considérons un maillage tel que celui de la figure 1, dans lequel les mailles sont indicées par la variable i, et ont un volume V_i^n variable au pas de temps n. La conservation de la masse totale s'écrit $M = \sum_{i} V_{i}^{n} \rho_{i}^{n}$, la conservation de la quantité de mouvement totale

de l'énergie totale est donnée par $E = \sum_i V_i^n \rho_i^n e_i^n$. Ici, ρ_i^n , u_i^n et e_i^n désignent la masse volumique, la vitesse et la densité d'énergie totale du fluide dans la maille courante. Ces formules expriment le fait qu'une certaine somme évaluée sur le maillage fournit un résultat qui ne dépend pas de l'indice du pas de temps. La vérification systématique de ces relations permet de garantir le respect des célèbres relations de *Rankine* et *Hugoniot* qui caractérisent les chocs. Les méthodes *ALE / AMR* vérifient facilement de tels principes de conservation pour des données numériques toutes centrées dans les mailles. Il restait à développer un schéma lagrangien de type *Godunov* qui vérifie ces principes [2].

s'exprime sous la forme $Q = \sum_i V_i^n \rho_i^n u_i^n$, et la conservation



Exemple de simulations lagrangienne 3D en géométrie convergente.

22

Une nouvelle méthode numérique

Décrivons très brièvement le point principal [3]. Celui-ci a consisté à développer un solveur de *Riemann* multidimensionnel [4], dans lequel certaines relations de bilan ou de nature thermodynamique sont appliquées aux nœuds du maillage. Le point nouveau est que les méthodes de *Godunov* utilisaient cette approche, mais ces relations étaient appliquées sur les facettes du maillage. Même si la distinction peut paraître mineure, c'est la structure mathématique et numérique complète de la méthode numérique qui est modifiée. Une autre application remarquée de cette approche se trouve dans les travaux de l'équipe du CELIA qui travaille sur la simulation FCI en attaque directe.

Un choc convergent

La figure 1 montre un exemple de similation hydrodynamique lagrangienne tridimensionnelle en géométrie convergente. Nous distinguons nettement un choc qui converge vers le centre du domaine *(le centre de la cible si l'on pense à une cible FCI)*. Le calcul a été réalisé deux fois, en configuration lagrangienne à gauche et en ajoutant une option de remaillage de type *AMR* à droite. Des comparaisons quantitatives montrent que la solution la plus précise est celle de droite. Cela illustre le gain de précision permis par ce genre de méthodes.



La figure 2 correspond à une simulation *ALE*. Nous distinguons un écoulement avec vorticité. L'utilisation de l'*ALE* a permis de régulariser le maillage au prix d'une légère perte de précision dans le cœur du vortex. La simulation prenait en compte trois matériaux différents, ce qui a nécessité l'utilisation d'une méthode adaptée. La simulation a été réalisée sur le calculateur TERA 10 avec un nombre de processeurs égal à 16. Elle démontre l'adaptabilité de tels algorithmes aux architectures multi-processeurs des calculateurs scientifiques modernes.

Conclusion

Les avancées récentes faites dans la compréhension mathématique des équations lagrangiennes de la dynamique des fluides compressibles, permettent de construire des méthodes numériques lagrangiennes originales. La confrontation avec les solutions traditionnelles devrait rapidement quantifier ces avancées.

Références

[1] S. GODUNOV, "Reminiscences about difference schemes", J. Comput. Phys., 153, p. 6-25 (1999).

[2] G. CARRÉ, S. DEL PINO, B. DESPRÉS, E. LABOURASSE, "A cell-centered Lagrangian hydrodynamics scheme on general unstructured meshes in arbitrary dimension", soumis à *J. Comp. Physics* (2009).

[3] B. DESPRÉS, C. MAZERAN, "Symmetrization of lagrangian gas dynamics and lagrangian solvers", *C. R. Acad. Sci. Paris*, **331**, p. 475-480 (2003).

 [4] B. DESPRÉS, C. MAZERAN, "Lagrangian gas dynamics in 2D and lagrangian systems", *Arch. Rat. Mech. Anal.*, 178, p. 327-372 (2005).



Simulation ALE décrivant un écoulement avec vorticité.

SCHÉTTIRS POUR L'HYDRODYNRITHQUE ET ÉQURTIONS D'ÉTRT NON CONVEXES

O. HEUZÉ, S. JAOUEN, H. JOURDREN CEA - DAM - ÎLE-DE-FRANCE

Simuler la propagation d'ondes dans des matériaux susceptibles de changer de phase sous choc (étain, plomb, etc.), soulève des problèmes pour lesquels les méthodes numériques actuelles n'ont pas été conçues. Nous proposons un cas-test simple qui rassemble les difficultés que les schémas numériques futurs devront surmonter pour résoudre les équations d'Euler dans ces situations.

Dans un matériau *classique*, l'équation d'état est convexe (*la célérité du son est une fonction croissante de la pression*) et les ondes d'amplitude finie se propagent soit en onde de choc, soit en faisceau de détente. Initiées dans les années 50, les méthodes utilisées aujourd'hui pour simuler ces phénomènes sont basées sur des schémas numériques d'ordre de plus en plus élevé afin de gagner en précision.

Cependant, lors des changements de phase ou au voisinage du point critique, l'équation d'état perd sa convexité et des systèmes d'ondes plus complexes apparaissent [1] : ondes composites avec dédoublement de choc, compression isentropique ou choc de raréfaction. Les critères mathématiques, sur lesquels s'appuient les méthodes numériques actuelles (condition d'entropie ou critère *de* Lax), ne sont alors plus suffisants pour garantir l'unicité de la solution. Ce problème est alors résolu par le critère plus restrictif d'existence d'un profil de viscosité. En pratique cela signifie qu'un schéma doit contenir suffisamment de diffusion numérique pour capturer une onde composite, ce qui semble incompatible avec l'emploi de schémas d'ordre élevé.

Nous proposons dans la référence [2] un cas-test simple constitué d'une équation d'état non convexe (matériau "Bizarrium") et d'une donnée initiale qui génère, de part et d'autre de la discontinuité de contact, les systèmes d'ondes composites obtenus en détente et en compression. À titre d'exemple, la figure 1 montre un scénario de détente / choc de raréfaction / détente à gauche et un autre de choc / compression isentropique /choc à droite.



Figure 1

"Benchmark Bizarrium". Courbes d'ondes issues des états gauche U_{y0} et droit U_{z0} dans les plans (p,τ) et (p,u) (haut) ; diagramme (x,t), où la ligne verte représente la discontinuité de contact, et profil de densité de la solution exacte (bas).

Panorama de schémas numériques

Pour illustrer les difficultés rencontrées, les deux grandes classes de méthodes, introduites dans les années 50 et toujours utilisées aujourd'hui, sont passées en revue. Les méthodes de type von *Neumann-Richtmyer* (vNR) [3] sont basées sur une formulation en énergie interne avec une viscosité artificielle pour le traitement des chocs. Cette viscosité permet de contrôler le degré de diffusion numérique du schéma et peut prendre de nombreuses formes [4] : viscosité linéaire *et/ou* quadratique, activée en compression voire en détente.

Les méthodes de type *Godunov* [5] sont formulées en énergie totale et reposent sur des solveurs de *Riemann* exacts ou approchés [4]. Associées au solveur acoustique d'ordre 1, trois extensions d'ordre élevé développées au CEA-DAM étaient jusqu'alors considérées comme robustes en contexte "équations d'état arbitraires": le solveur GAD (*Godunov Anti-Diffusé*) du second ordre et les solveurs d'ordre arbitraire *GAIA* (Godunov Acoustic Invariant Advection) et *GoHy* (Godunov Hybride) [2].

Résultats

Quelques résultats tirés de [2] sont présentés sur la figure 2, avec la convention suivante pour les légendes : schémaordre, type de limiteur. Probablement en raison du défaut de conservativité, le schéma *vNR* historique ne converge pas vers la solution physique. Sa version conservative BBC ([2] *et références incluses*) se révèle quant à elle satisfaisante, mais à condition d'activer la viscosité linéaire en compression et détente avec un coefficient supérieur à ceux généralement utilisés. Principale avancée des schémas de type *vNR* dans les années 80-90, une évaluation de la viscosité artificielle au second ordre [4] est alors possible, sous réserve d'utiliser un limiteur très dissipatif (Minmod *plutôt que* Christensen), afin de contrôler les oscillations au niveau des chocs.

Concernant les schémas de type Godunov, un fait remarquable est que la solution physique est capturée avec le solveur acoustique d'ordre 1 sans aucun coefficient empirique. Mais là encore, les trois extensions à l'ordre 2 (GAD, GAIA *et* GoHy), ne donnent de résultats satisfaisants qu'avec le limiteur le plus dissipatif (Minmod *plutôt que* TVD), et actuellement, aucun des schémas d'ordre supérieur considérés ne convergent vers la bonne solution. Ces défauts de convergence sont attribués à un niveau de diffusion numérique insuffisant pour accrocher le profil de viscosité des ondes composites.

Conclusion

Les schémas numériques d'ordre élevé, qui permettent un gain de précision significatif lorsque l'équation d'état est convexe, sont mis en défaut dès que l'on sort de ce cadre standard, en particulier lors de la prise en compte des changements de phase.

Le cas-test [2] constitue un moyen simple d'évaluer et de comparer les schémas numériques actuels et futurs dans les cas de non-convexité de l'équation d'état.

Références

[1] R. MENIKOFF, B. J. PLOHR, "The Riemann problem for fluid flow of real materials", *Rev. Mod. Phys.*, **61**, p. 75-130 (1989).

[2] O. HEUZÉ, S. JAOUEN, H. JOURDREN, "Dissipative issue of high-order shock capturing schemes with non-convex equations of state", *J. Comp. Phys.*, **228**, p. 833-860 (2009).

[3] J. VON NEUMANN, R.D. RICHTMYER, "A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks", *J. Appl. Phys.*, **21**, p. 232-237 (1950).

[4] D. J. BENSON, "Computational methods in Lagrangian and Eulerian hydrocodes", *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **99**, p. 235-394 (1992).

[5] S. K. GODUNOV, "A finite difference method for the numerical computation of discontinuous solutions of the equations of fluid dynamics", *Math. Sb.*, **47**, p. 271-306 (1959).



Figure 2

Profils de densité à $t = 80 \ \mu s$ sur 10000 mailles obtenus avec quelques versions des schémas de type vNR et Godunov utilisées dans les codes d'hydrodynamique (voir [2] pour des résultats plus complets).

La plupart montre de sévères pathologies (gauche). Seules les versions les plus dissipatives de ces schémas capturent la solution physique (droite).

LE NOYAU DUR DE LA STRUCTURE NUCLÉRIRE THÉORIQUE

N. PILLET, S. PERU, S. HILAIRE, H. GOUTTE, M. GIROD, F. CHAPPERT, J.-F. BERGER CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE

L'étude de la structure des noyaux connait un regain d'activité, notamment grâce aux nouvelles perspectives offertes par les faisceaux radioactifs SPIRAL puis SPIRAL2 du GANIL, aux études nécessaires pour les différents cycles électronucléaires, et au programme simulation du CEA-DAM. L'immense diversité des états du noyau rend sa modélisation extrêmement complexe. Actuellement, en physique nucléaire théorique, deux défis majeurs restent à relever : déduire l'interaction nucléon-nucléon effective dans les noyaux de l'interaction forte fondamentale et résoudre le problème à N-corps nucléaire. Le développement spectaculaire des supercalculateurs ces dernières années a permis la mise en œuvre de projets ambitieux qui ont conduit à des avancées significatives dans ces deux domaines.

La structure nucléaire théorique est un des pôles d'excellence du CEA-DAM. Dès les années 70, D. Gogny propose une forme analytique de l'interaction effective entre deux nucléons au sein du milieu nucléaire [1], [2]. Son principal atout : la portée finie introduite dans un de ses termes qui traduit l'interaction à distance des nucléons. Utilisée dans le contexte des théories de champ moyen, cette interaction, dont la paramétrisation est appelée D1S, rend compte de façon très satisfaisante de nombreuses propriétés des noyaux. Elle permet de décrire l'appariement des nucléons responsable de la superfluidité nucléaire, un phénomène très important dans les noyaux, ainsi que la dynamique des mouvements collectifs, en particulier le phénomène de fission. Toutefois, des améliorations doivent être apportées à cette force "historique", en particulier afin de mieux décrire les noyaux riches en neutrons dits "exotiques", et de permettre son emploi dans les nouvelles approches en cours de développement au CEA–DAM - Île-de-France.

Vers une interaction de Gogny étendue

Afin d'étendre la paramétrisation D1S, plusieurs voies ont été explorées. La première voie porte sur le réajustement des paramètres de l'interaction pour obtenir une meilleure description des masses des noyaux. Ce réajustement s'est fait en deux étapes. Dans une première étude [3], la dérive systématique des masses le long des chaînes isotopiques a été corrigée, en tenant compte de l'équation d'état de la matière neutronique. La figure 1 illustre l'amélioration obtenue avec le nouveau jeu de paramètres, appelé D1N. Dans une seconde étude plus fine [4], la déviation standard sur les masses a été ramenée de 3 MeV à 800 keV, grâce à une procédure complexe d'ajustement intégrant notamment les données expérimentales de près de 700 noyaux.

La seconde voie d'amélioration de la force porte sur l'extension de sa forme analytique afin de permettre son utilisation dans des théories plus générales que les approches de champ moyen, théories actuellement en cours de développement. Une première étape a été franchie dans un travail de thèse où une portée non nulle a été introduite dans la composante de la force dépendant de la densité nucléaire [5]. La justification fondamentale de la forme analytique ainsi postulée a fait l'objet d'une autre thèse, au cours de laquelle des formes encore plus générales ont été proposées [6].

Vers une description unifiée du noyau

Parallèlement aux travaux sur l'interaction, l'extension de formalismes existants et le développement de nouvelles approches ont été initiés. Ainsi la méthode "RPA" (Random Phase Approximation), jusqu'ici appliquée aux seuls noyaux sphériques non superfluides, a été étendue aux noyaux déformés axialement et présentant des corrélations d'appariement. Cette approche, appelée "QRPA" (Quasiparticle RPA), permet de décrire de façon cohérente les excitations collectives et individuelles d'un grand nombre de noyaux. L'étude des isotopes du magnésium et du silicium a montré l'impact de la déformation intrinsèque des noyaux sur les résonances géantes [7]. En outre, pour une description encore plus complète des états de basse énergie du noyau, une nouvelle méthode a été proposée avec pour objectif un traitement unifié des corrélations de longue portée.

Ce "mélange de configurations multiparticules-multitrous variationnel" permet d'éviter les approximations usuelles, comme la non-conservation du nombre de particules ou la violation du principe de *Pauli*. Une étude sur les propriétés des états fondamentaux des isotopes de l'étain a notamment montré l'importance de la conservation du nombre de particules dans la description de la superfluidité nucléaire [8].

Conclusion

L'année 2008 a été marquée par plusieurs travaux importants en physique nucléaire théorique, d'une part sur l'interaction effective, d'autre part sur la résolution du problème à N-corps. Ces travaux sont en train d'aboutir à une approche très ambitieuse de la structure nucléaire qui devrait permettre, dans un proche avenir, de décrire avec une précision accrue l'ensemble des noyaux envisageables ainsi que les phénomènes complexes comme la fission.

Références

[1] J. DECHARGÉ, D. GOGNY, "Hartree-Fock-Bogoliubov calculations with the D1 effective interaction on spherical nuclei", *Phys. Rev. C*, **21**, p. 1568-1593 (1980).

[2] J.-F. BERGER, M. GIROD, D. GOGNY, "Time-dependent quantum collective dynamics applied to nuclear fission", *Comp. Phys. Comm.*, **63**, p. 365-374 (1991).

[3] F. CHAPPERT, M. GIROD, S. HILAIRE, "Towards a new Gogny force parametrization : impact of the neutron matter equation of state", *Phys. Lett. B*, **668**, p. 420-424 (2008).

[4] S. GORIELY, S. HILAIRE, M. GIROD, S. PERU, soumis à *Physical Review Letters*.

[5] F. CHAPPERT, "Nouvelles paramétrisations de l'interaction nucléaire effective de Gogny", Thèse de doctorat – Université Paris Sud – XI (2007).

[6] V. ROTIVAL, "Fonctionnelles d'énergie non empiriques pour la structure nucléaire", Thèse de doctorat – Université Denis Diderot, Paris VII (2008).

[7] S. PÉRU, H. GOUTTE, "Role of deformation on giant resonances within the quasiparticle random-phase approximation and the Gogny force", *Phys. Rev. C*, **77**, p. 044313 (2008).

[8] N. PILLET, J.-F. BERGER, E. CAURIER, "Variational multiparticle-multihole configuration mixing method applied to pairing correlations in nuclei", *Phys. Rev. C*, **78**, p. 024305 (2008).



Figure 1

Différences δB entre masses théoriques et expérimentales calculées avec D1S et D1N en fonction du nombre de neutrons le long des chaines isotopiques (à différents Z).

mesure de l'équation d'état de l'hélium dense et chaud

S. BRYGOO*, P. LOUBEYRE*, J. EGGERT**, P. CELLIERS**, G. COLLINS**, R. JEANLOZ*** *CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE, **LAWRENCE LIVERMORE NATIONAL LABORATORY (LLNL), USA, ***UNIVERSITY OF CALIFORNIA, USA.

La connaissance de l'équation d'état de l'hélium et surtout de l'hydrogène, dans le domaine des hautes densités et des hautes températures, est centrale dans de nombreuses applications, comme la modélisation des intérieurs planétaires ou le dimensionnement des cibles de fusion par confinement inertiel (FCI). Cependant, la mesure de la relation entre le volume, la pression, l'énergie, la température et l'ionisation du système dans ce domaine thermodynamique restait un défi expérimental. Nous avons développé une nouvelle technique qui couple la compression statique et la compression dynamique. Elle est basée sur la génération de chocs laser dans des cellules à enclumes de diamant. Les mesures sur l'hélium, présentées ci-dessous, sont actuellement les plus abouties.



Principe de l'expérience

La grande qualité des mesures dynamiques est que la mesure de deux vitesses, celle d'un piston et celle d'un front de choc, permet d'obtenir la pression, la densité et l'énergie de la matière choquée, au travers des relations de Rankine-Hugoniot, et donc d'obtenir directement l'équation d'état. En faisant varier la densité de l'état initial, un faisceau de courbes Hugoniot peut ainsi être généré. Cela est faisable en générant un choc laser dans une presse à enclumes de diamant [1], [2]. La figure 1 présente le schéma de l'expérience. Le choc est généré à l'aide du laser Omega de l'université de Rochester aux USA. Le laser est focalisé sur une couche d'ablateur déposée sur la face avant de la fenêtre. L'ablation rapide, produite par effet fusée, engendre un choc qui se propage dans la fenêtre, le quartz et l'échantillon d'hélium. Une métrologie utilisant le guartz comme matériau de référence permet de s'affranchir des faibles dimensions de l'échantillon et d'effectuer des mesures cinématiques résolues spatialement et temporellement avec un interféromètre VISAR [3].

Mesures de l'équation d'état de l'hélium

Les seules données existantes sur l'équation d'état de l'hélium dense avaient été obtenues par des chocs générés par un canon à gaz sur des cibles cryogéniques jusqu'à une pression de 16 GPa [4]. À l'aide des cibles pré-comprimées, la mesure de l'équation d'état de l'hélium a été étendue d'un ordre de grandeur en densité. Les données expérimentales sont reportées sur la figure 2.



Par interaction du laser Omega avec la face arrière de la cible pré-comprimée, une onde de choc est générée dans l'échantillon. Les mesures des vitesses de choc dans le quartz et l'hélium sont réalisées par une méthode interférométrique à l'aide d'un VISAR. Sur l'image VISAR, la planéité du choc et la résolution spatiale et temporelle sont clairement démontrées. La figure de mérite, pour une comparaison aux prédictions théoriques, est le facteur de compression maximum le long d'une courbe *Hugoniot*. Un facteur de compression maximum de 6 est mesuré [5]. Les différentes approches théoriques les plus récentes donnent un maximum de compression de 5 pour les calculs *ab-initio*, et de 6 pour deux modèles décrivant les interactions entre les atomes d'hélium et leurs ions. En revanche, en augmentant la densité initiale, la compression maximale le long de l'hugoniot se rapproche de 4. Cette variation de compression maximale permet de séparer deux contributions opposées, celle de l'excitation des degrés électroniques internes et celle de l'augmentation de la densité.



Courbes Hugoniot de l'hélium pour une pré-compression de 1,2 kbar ($\rho_0 = \rho_L = 0,123 \text{ g/cc}$), en rouge et 15 kbar ($\rho_0 = 3,4 \rho_L$), en bleu. Les points obtenus par canon à gaz sur cible cryogénique sont aussi reportés sur l'Hugoniot principale [4]. Différents calculs sont comparés aux mesures expérimentales.

Transition isolant conducteur de l'hélium dense

Des mesures de réflectivité ont été effectuées en mesurant la réflexion du laser sonde du VISAR sur le front de choc. Des mesures de température ont été aussi effectuées à l'aide d'un pyromètre. Le passage de l'hélium transparent, opaque puis réfléchissant le long des différentes courbes Hugoniot, est clairement la signature du passage d'un fluide isolant à un fluide conducteur. En ajustant un modèle de semi-conducteur et de conductivité de Drude sur nos données, nous avons montré que le "gap" électronique de l'hélium était de 10 eV autour de 1 g/cc et qu'il se fermait rapidement avec la densité. Sur la figure 3, nous avons tracé nos points de mesure avec une échelle de couleur de réflectivité dans le diagramme de phases de l'hélium. Les lignes de transition prédites par deux modèles chimiques semblent en désaccord avec nos mesures.

Conclusion

Cette étude sur l'hélium permet de démontrer la potentialité d'une nouvelle approche expérimentale de la "warm dense matter" (WDM), particulièrement adaptée aux systèmes très compressibles, comme l'hélium et l'hydrogène. La mesure des propriétés physiques d'un état thermodynamique bien caractérisé est ainsi accessible. Ces premières données montrent que la description de la *WDM* n'est pas entièrement satisfaisante. En particulier, la validité des méthodes *ab-initio*, prouvée pour décrire la matière à 0 K, doit être remise en cause dans ce régime thermodynamique. Cette approche expérimentale sera étendue à l'hydrogène pour des densités extrêmes en utilisant les installations laser LIL et NIF dans les trois ans à venir.

Références

[1] P. LOUBEYRE *et al.*, "Coupling static and dynamic compressions with a laser shock in a diamond anvil cell and the properties of dense fluid hydrogen", *High Pressure Research*, **24**, p. 25-31 (2004).

[2] R. JEANLOZ *et al.*, "Achieving high-density states through shock-wave loading of precompressed samples", *PNAS*, **104**, p. 9172-9177 (2007).

[3] S. BRYGOO, "Chocs laser sur l'hélium, l'hydrogène et le diamant : une étude expérimentale de la Warm Dense Matter", Thèse de doctorat, École Polytechnique / CEA (2007).

[4] W. NELLIS et al., "Shock compression of liquid helium", Phys. Rev. Lett., 53, 1248, (1984).

[5] J. EGGERT *et al.,* "Hugoniot of helium in the ionization regime", *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 124503 (2008).



Figure 3

Diagramme de phases de l'hélium "warm dense". Nos mesures, avec une échelle de couleur pour la réflectivité, indiquent clairement le passage fluide isolant - fluide conducteur. Des lignes de transition d'ionisation de l'hélium calculées par des modèles chimiques sont comparées aux mesures expérimentales.

"RBINIT" : UN CODE RU SERVICE DE LA MATIÈRE

B. AMADON, F. BOTTIN, J. BOUCHET, A. DEWAELE, F. JOLLET, G. JOMARD, P. LOUBEYRE, S. MAZEVET, V. RECOULES, M. TORRENT, G. ZERAH CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE

> Le domaine des calculs de physique du solide s'est caractérisé ces dernières années par le développement fulgurant des approches dites "ab initio", y compris pour le plutonium dont le comportement exotique commence à être bien compris et simulé.

Le développement continu des calculateurs massivement parallèles permet d'utiliser ces techniques "ab initio" pour une simulation systématique des propriétés des matériaux purs et de leurs composés (oxydes) et alliages. Ces mêmes techniques sont employées pour simuler des propriétés thermodynamiques et optiques des plasmas, tendant ainsi à supplanter progressivement les méthodes classiques d'atome moyen.

Dans le domaine expérimental, la caractérisation plus fine des matériaux à l'échelle atomique fournit des informations très précises, directement comparables aux simulations numériques, ce qui donne accès à un couplage entre les calculs et l'expérience inconnu à ce jour. Un exemple frappant en est donné par le progrès des techniques de mesure sous haute pression en cellule à enclumes de diamant, dont la précision atteint celle accessible à pression ambiante, tant pour les propriétés thermodynamiques que spectroscopiques.



Comment rendre compte des fortes variations de densité électronique autour des noyaux atomiques en même temps que des variations douces entre les atomes ? C'est la question à laquelle tentent de répondre les développements numériques récents effectués dans le code de calcul de structure électronique ABINIT [1]. En matière de développement numérique, l'aboutissement de l'implémentation de la méthode PAW (Projector Augmented Wave) constitue une avancée particulièrement importante pour les calculs de structure électronique : cette méthode est une extension des méthodes "tous électrons" et de l'approche pseudopotentielle, menant à une méthode de calcul de structure électronique unifiée. Elle repose sur l'utilisation simultanée d'une base de fonctions auxiliaires (en ondes planes) et d'une base de fonctions locales définies dans une sphère autour de chaque atome. Il est alors possible de traiter des systèmes comprenant beaucoup d'atomes, en particulier des métaux lourds, et d'obtenir l'expression de toutes les quantités que l'on souhaite évaluer (énergie, forces, contraintes, etc.) en fonction uniquement de la fonction auxiliaire.

L'implémentation de cette méthode a été menée à bien dans le code *ABINIT* [2]. Elle donne ainsi accès aux quantités "tous électrons" pour un coût numérique moindre. Nous avons appliqué la méthode *PAW* à l'étude du fer sous pression, qui a une grande importance dans la structure interne du cœur terrestre. Nous avons généré des données atomiques *PAW* pour le fer valables à très hautes pressions, au moins 200 GPa sans recouvrement des sphères. Un accord remarquable est obtenu avec les résultats "tous électrons" déjà publiés dans la littérature. Nous obtenons une transition de phase bcc-hcp vers 10 GPa. L'ordre magnétique disparaît vers 50 GPa. Nous avons testé l'ordre antiferromagnétique de type II dans la gamme 10-50 GPa. Le désaccord qui persiste avec l'expérience pourrait suggérer un ordre magnétique plus complexe.

D'une façon plus générale, une comparaison entre les équations d'états de huit métaux mesurées expérimentalement et calculées avec le code ABINIT-PAW (figure 1) a permis de quantifier leurs différences et de corréler le succès des approximations du terme d'échange et de corrélation avec le numéro atomique [3]. Le développement de la méthode PAW s'est accompagné d'un effort important sur la parallélisation du code, grâce à un schéma fondé sur un algorithme de résolution d'équations utilisant une transformée de Fourier rapide tridimensionnelle optimisée [4]. En plus du partage standard des données sur les processeurs, nous introduisons un partage des données par blocs de bandes ainsi qu'un partage dans l'espace de Fourier de toutes les données développées sur une base d'ondes planes. Cette parallélisation k-bande-FFT évite toute communication collective sur l'ensemble des processeurs et ne fait appel qu'à des communications sur un seul niveau de parallélisation. En combinant ces trois parallélisations nous pouvons obtenir un facteur d'accélération quasi linéaire jusqu'à 1000 processeurs.

Des courbes de fusion à hautes pressions

La maîtrise combinée de la génération de pseudo-potentiels (décrivant l'interaction entre le noyau et les électrons de cœur sur les électrons de valence) et d'un logiciel performant nous permet maintenant de calculer des courbes de fusion haute pression entièrement *ab initio*. Les courbes de fusion des métaux sont pour la plupart très mal caractérisées car difficilement mesurables par les méthodes statiques jusqu'aux pressions désirées. Bien que les expériences sous choc permettent d'atteindre facilement ces hautes pressions, elles le sont malheureusement pour des températures contraintes de suivre l'*Hugoniot*. Dans ce contexte, les calculs

ab initio, prédictifs par définition, viennent combler ce "gap" expérimental : nous avons donc mis en place une méthode de simulation permettant de calculer cette grandeur thermodynamique sur une large gamme de pressions.

Ces calculs, d'abord réalisés sur l'aluminium, se poursuivent maintenant par des calculs de fusion du fer et de ses alliages pour les conditions rencontrées dans la graine ou à l'interface graine /noyau liquide terrestre. Ces conditions n'ont jamais été mesurées directement. Cette incertitude limite sévèrement les modèles actuels du noyau terrestre, car l'équation d'état du fer à haute pression est la contrainte la plus importante pour déterminer sa balance énergétique et chimique. La découverte prévisible de planètes telluriques, en dehors du système solaire dans les décennies à venir, rend encore plus pertinente l'exploration du diagramme de phase du fer pour des pressions supérieures à 500 GPa et des températures au dessous de 1eV.



Figure 1

Comparaison des équations d'état mesurées expérimentalement et calculées avec le code ABINIT.

Spectre *ab initio* dans le domaine X

L'utilisation de pseudo-potentiels dans les méthodes de dynamique moléculaire limite les calculs de spectre d'absorption aux fréquences inférieures à 100 eV. Pour accéder au régime X, où les électrons de cœur participent à l'absorption, il est nécessaire d'inclure ces derniers. À cette fin, nous avons développé la méthode dite de Kubo-Greenwood pour inclure les électrons de cœur dans le formalisme PAW. Ces développements ont permis de calculer pour la première fois des spectres XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) de plasmas denses de manière entièrement ab initio. La confrontation avec les données expérimentales pour le seuil K a permis de mettre en évidence les limites de l'approximation du cœur "gelé" pour décrire la matière sous des conditions de haute température et haute pression [5]. Ces développements nous permettent maintenant d'envisager la description d'absorption par des sources X intenses de type XFEL (X-ray Free-Electron Laser) qui modifient profondément la structure électronique du système.

Un traitement amélioré des électrons localisés

La théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) a par ailleurs permis de décrire de nombreux solides, notamment dans l'approximation de la densité locale (*LDA*) et ses variantes. Néanmoins, la description des systèmes dans lesquels les orbitales localisées 3d, 4f ou 5f sont partiellement remplies, nécessite de lever ces approximations afin de prendre en compte les fortes interactions entre les électrons. Une solution est de les inclure explicitement par l'ajout d'un terme dans l'hamiltonien. La résolution de cet hamiltonien, dans l'approximation du champ moyen statique, conduit à la méthode *LDA+U* et permet de bien mieux décrire les propriétés fondamentales des isolants corrélés.

Nous avons implémenté cette méthode dans le code *ABINIT-PAW*. L'étude de l'oxyde de nickel NiO et du gadolinium a permis de valider cette implémentation. L'analyse des phases β et γ du cérium a reproduit des propriétés liées à la localisation des orbitales f [6]. Une autre application importante de la méthode *LDA+U* concerne les oxydes d'actinides, et en particulier ceux du plutonium, dans lesquels les effets de localisation des électrons doivent être pris en compte pour décrire l'état isolant de ces matériaux. Dans le but de caractériser les processus d'absorption des adsorbats, de définir les réactions de surface au niveau atomique, et de déterminer les relations entre l'activité catalytique du solide et sa structure électronique, nous nous sommes intéressés à la caractérisation des surfaces propres. Nous avons ainsi étudié leur structure atomique ainsi que leur stabilité thermodynamique en fonction de l'environnement extérieur à partir de simulations *ab initio* [7].

Pour les trois orientations de surface (110), (100) et (111) de la maille fluorine, plusieurs terminaisons ont été envisagées (*figure 2*). Les résultats numériques sont conformes à ce que nous attendions. Les terminaisons les plus stables sont soit les terminaisons non polaires PuO_2 -(110), soit celles polaires et compensées par la stœchiométrie : O-(100) et O-(111) [11].

Des modes mous dans la matière dure ?

Les spectres de phonons sont d'une importance considérable, car ils fournissent des renseignements précieux sur les transitions de phases, les propriétés élastiques, et permettent de calculer l'entropie de vibration du réseau, et donc l'énergie thermique associée au mouvement des atomes.

Malgré le grand intérêt porté aux éléments contenant des électrons f (*lanthanides et actinides*), nous ne savons que peu de choses sur leurs propriétés dynamiques et leurs spectres de phonons, que ce soit d'un point de vue expérimental ou théorique. Ce fait s'explique par les défis immenses que pose la mise en œuvre d'expériences sur ces éléments ou la modélisation à l'échelle microscopique des interactions entre électrons f. La découverte des ondes de densités de charge (*ODC*) dans l'uranium est intimement liée aux expériences de diffraction de neutrons qui ont permis d'obtenir un spectre de phonons de l'uranium. Celui-ci présente des courbes de dispersion très remarquables dans la direction (100). Le mode longitudinal optique Σ_4 présente un minimum, appelé mode "mou", autour du point [0,5 ; 0 ; 0].



Représentation des trois orientations de la maille fluorine de PuO₂. De gauche à droite : les plans (100), (111) et (110).

De plus la fréquence de ce mode décroît considérablement avec la température. Nous pouvons en conclure que la cellule unité α -U est doublée dans la direction (100) à la suite d'une distorsion périodique du réseau. Nous avons calculé le spectre de phonons de l'uranium à 0 K [8]. Les résultats sont présentés sur la *figure 3* et sont comparés aux données des expériences de diffraction de neutrons. Ils fournissent le premier spectre de phonons *ab initio* de l'uranium.

Perspectives

La maîtrise du code *ABINIT* nous conduit maintenant à développer de nouvelles fonctionnalités qui vont permettre des avancées importantes, en particulier pour la compréhension des métaux lourds : obtention des spectres de phonons dans le formalisme *PAW*, magnétisme non colinéaire, couplage spin-orbite, et méthodes au-delà de l'approximation *LDA+U* incluant les fluctuations dynamiques locales.



[1] X. GONZE *et al.,* "First-principles computation of material properties : the ABINIT software project", *Comput. Mater. Sci.*, **25**, p. 478-492 (2002).

[2] M. TORRENT *et al.*, "Implementation of the projector augmented-wave method in the ABINIT code", *Comput. Mater. Sci.*, **42**, p. 337-351 (2008).

[3] A. DEWAELE *et al.,* "Compression curves of transition metals in the Mbar range: Experiments and projector augmented-wave calculations", *Phys. Rev. B*, **78**, 104102 (2008).

[4] F. BOTTIN *et al.*, "Large-scale ab initio calculations based on three levels of parallelization", *Comput. Mater. Sci.*, **42**, p. 329-336 (2008).

[5] S. MAZEVET *et al.*, "Ab initio simulations of the K-edge shift along the Aluminum Hugoniot", *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 155001 (2008).

[6] B. AMADON *et al.*, " γ and β cerium: LDA + U calculations of ground-state parameters", *Phys. Rev. B*, **77**, 155104 (2008).

[7] G. JOMARD *et al.,* "Structural, thermodynamic, and electronic properties of plutonium oxides from first principles", *Phys. Rev. B*, **78**, 075125 (2008).

[8] J. BOUCHET, "Lattice dynamics of α uranium", *Phys. Rev. B*, **77**, 024113 (2008).



Figure 3 Spectre de phonons de l'uranium.

Les triangles correspondent aux expériences de neutrons ; les courbes se réfèrent aux résultats ABINIT [8].

EFFETS DE L'USINAGE SUR LA SURFACE ET LA SOUS-COUCHE D'UN MÉTAL PUR

S. BISSEY-BRETON*, J. GRAVIER*,**, V. VIGNAL**, R. BESNARD*, J. FARRÉ* *CEA – VALDUC, **INSTITUT CARNOT BOURGOGNE (ICB), UMR 5209 CNRS-UNIVERSITE DE BOURGOGNE, DIJON.

Les mécanismes complexes mis en jeu lors d'un usinage affectent l'état mécanique, microstructural et topographique des métaux. De nombreux développements technologiques et scientifiques permettent de minimiser l'amplitude des défauts de type géométrique. Toutefois, ces modifications ont également une influence sur la réactivité des surfaces usinées. Le projet présenté, relatif au tournage de superfinition du cuivre, permet de caractériser l'influence de paramètres d'usinage sur le matériau, de dégager des réponses significatives telles que des mesures de rugosité, de contraintes ou de réactivité de la surface, mais également d'extraire trois domaines dans la zone affectée, correspondant à des phénoménologies différentes. Une telle analyse permettra d'approfondir la connaissance du procédé d'usinage et d'améliorer l'intégrité des pièces usinées.

La précision et la qualité de surface obtenues par usinage sont liées à une interaction complexe entre le matériau et l'outil coupant, qui génère des dégagements de chaleur et de fortes déformations [1]. L'usinage entraîne également des contraintes résiduelles au cœur du matériau et modifie significativement la microstructure et l'orientation cristallographique en proche surface [2], [3]. Le but de cette étude est de quantifier les relations entre les conditions de coupe et les propriétés d'usage des surfaces usinées. Des essais expérimentaux d'usinage du cuivre *(matériau d'étude)* ont permis de caractériser puis de modéliser l'état du matériau sur trois échelles.

Étude en volume (échelle macroscopique)

Les champs de contraintes déterminées par diffraction des rayons X montrent que les effets thermo-mécaniques de la coupe altèrent l'état de contraintes de la pièce : traction en extrême surface, puis compression en allant vers le cœur du matériau. À cette échelle macroscopique, une modélisation des champs de température, contraintes et déformations, a été développée. Ce modèle s'appuie sur les expressions analytiques des déplacements de la matière à proximité de l'outil données par Jacobus *et al.* [4]. Cette modélisation de type "éléments finis" permet de prédire les champs de contraintes résiduelles et de température dans la pièce.

Étude en proche surface (échelle microscopique)

Cette échelle d'étude permet d'évaluer les modifications métallurgiques et microstructurales. Les observations par microscopie optique (figure 1) et par microscopies électroniques à balayage ou à transmission permettent de constater une réduction de la taille des grains en se rapprochant de la surface, en liaison avec les mesures par profilométerie optique (figure 2). Par ailleurs, l'augmentation de la densité de dislocations (représentative de la plastification du matériau) vers la surface usinée a été quantifiée par nanoindentation. Le modèle établi à l'échelle macroscopique permet aussi de prédire cette évolution de la densité de dislocations, grâce à une approche physique de la plastification du cuivre.



Figure 1 Microstructure de la sous-couche par observation optique.

La confrontation de ces résultats avec le champ de température permet de déterminer si une recristallisation dynamique [5] a eu lieu ou non au cours de l'usinage. Dans ce cas, le modèle indique la profondeur du matériau affectée par le procédé.

Étude en extrême surface (échelle nanométrique)

Il a été montré aux échelles précédentes que l'usinage affecte très sensiblement les propriétés de surface (contraintes, rugosité, texture cristallographique...) des matériaux métalliques. Ceci indique que les pièces usinées peuvent réagir différemment lorsqu'elles sont exposées à un environnement agressif. Afin d'étudier cette sensibilité, le comportement électrochimique des surfaces usinées a été étudié à l'aide d'une microcellule dans une solution saline. Les analyses ont montré le rôle prépondérant des contraintes de surface qui accélèrent la dissolution anodique des surfaces. D'autre part, il a été aussi remarqué qu'en absence de texture cristallographique de cisaillement, le risque d'amorcer une corrosion par piqûres augmente avec des contraintes élevées [6].

Conclusion

Cette étude nous a permis d'avoir accès à une modélisation thermo-métallurgique de l'impact des conditions d'usinage sur les pièces usinées. Le lien a été établi entre la mécanique et la métallurgie en considérant les effets dynamiques de l'usinage. En parallèle, l'impact des propriétés des surfaces réelles sur leur réactivité a été quantifié. Les développements ultérieurs viseront à établir le lien direct entre les conditions de coupe et les déformations de surface, sans passer par les déplacements de matière induits par la coupe.

Références

[1] P.L.B. OXLEY, "The mechanics of machining: an analytical approach to assessing machinability", Ellis Horwood Limited, Chichester (1989).

[2] E. BRINKSMEIER, J. J. CAMMETT, P. LESKOVAR, J. PETERS, H. K. TONSHOFF, "Residual stresses-measurements and causes in machining processes", *Ann. CIRP*, **31**, p. 491–510 (1982).

[3] M. JACOBSON, "Surface integrity of hard-turned M50 steel", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, *Part B: Journal of Engineering Manufacture*, **216**, p. 47-54 (2002).

[4] K. JACOBUS, R. E. DE VOR, S. G. KAPOOR, "Machining Induced Residual Stresses: Experimentation and Modelling", *Transaction of ASME*, **122**, p. 20-30 (2000).

[5] R. D. DOHERTY, D. A. HUGHES, F. J. HUMPHREYS, J. J. JONAS, D. J. JENSEN, M. E. KASSNER, W. E. KING, T. R. MCNELLEY, H. J. MCQUEEN, A. D. ROLLETT, "Current issues in recrystallization: a review", *Materials Science and Engineering*, A 238, p. 219-274 (1997).

[6] J. GRAVIER, V. VIGNAL, S. BISSEY-BRETON, J. FARRÉ, "The use of linear regression methods and Pearson's correlation matrix to identify mechanical-physical-chemical parameters controlling the micro-electrochemical behaviour of machined copper", *Corrosion Science*, **50**, p. 2885-2894 (2008).



Rugosité d'une surface usinée obtenue par profilométrie optique.

MODÉLISATION THERMIQUE MULTI-ÉCHELLE DE MILIEUX HÉTÉROGÈRES

D. ROCHAIS, F. ENGUEHARD CEA – LE RIPAULT

Les moyens de description de la microstructure de matériaux complexes par tomographie X ou par des algorithmes adaptés ont ouvert la voie au calcul des propriétés thermiques de ces milieux. À partir de ces descriptions, nous avons développé une démarche originale de modélisation multi-échelle des transferts par conduction et rayonnement. Cette démarche a pu être appliquée à des matériaux de types composites, alvéolaires, multicouches, superisolants nanoporeux, conçus et élaborés par le CEA pour être utilisés, par exemple, pour leurs propriétés de tenue à une rentrée atmosphérique, de diffuseur de gaz à haute température, d'isolation thermique... Dans cet article, nous illustrons cette approche par deux exemples traitant l'un de la conduction et l'autre du rayonnement.

Conduction

Pour modéliser le transfert conductif au sein d'un milieu hétérogène, il faut d'abord connaître les propriétés thermiques des constituants de base. Celles-ci sont soit mesurables (jusqu'à l'échelle du µm) soit modélisables (échelle du nm [1]). Ensuite, il faut décrire la microstructure du matériau, éventuellement à plusieurs échelles spatiales suivant la taille et l'agencement des constituants. Le développement de la tomographie X et l'évolution des moyens informatiques permettent de reconstruire des volumes de "matière numérique" représentatifs des matériaux. Des codes de calcul spécifiques, s'inspirant de techniques expérimentales de type "plaque chaude gardée" (PCG) et "méthode flash" [2], ont été développés pour déterminer la conductivité thermique et la diffusivité thermique effectives de ces volumes numériques. La figure 1 représente la simulation d'un essai PCG appliqué à un feutre constitué de fibres de SiC (carbure de silicium). La méthode de résolution repose sur une discrétisation par différences finies du volume de simulation. Les propriétés thermiques locales, associées soit à une fibre, soit au gaz, sont attribuées à chaque cube élémentaire supposé homogène et isotrope. Une différence de température est imposée entre deux faces du volume (les autres faces étant adiabatiques). Le champ de température une fois calculé, le flux transitant entre les faces chaude et froide est déterminé et la conductivité thermique effective dans le sens du gradient peut être déduite.



Lorsque nous avons affaire à des matériaux poreux de faible conductivité thermique effective ou portés à de hautes températures, le transfert radiatif en leur sein ne peut pas être ignoré. Ces dernières années, les matériaux superisolants thermiques nanoporeux ont fait l'objet d'études de modélisation radiative au CEA.



Figure 1

Détermination, par la technique PCG numérique, de la conductivité thermique effective d'un feutre de SiC à partir d'une tomographie X de sa microstructure $(1,7 \times 1,7 \times 1,1 \text{ mm}^3)$. Ces études visaient deux objectifs associés à deux échelles d'observation différentes : d'une part, à l'échelle macroscopique, mettre en œuvre des modèles d'homogénéisation permettant de rendre compte du transfert radiatif au sein de ces matériaux en fonction de leur composition et de la température à laquelle ils sont portés, et d'autre part, à une échelle plus locale, étudier l'impact de la microstructure de ces matériaux sur leurs propriétés radiatives effectives.

La première étude, basée sur la notion de conductivité thermique radiative de *Rosseland*, a essentiellement révélé le rôle clé joué par les microparticules opacifiantes dans l'extinction du flux radiatif : dispersées au sein de la matrice nanoporeuse de silice en très faible fraction volumique, ces microparticules peuvent atténuer le transfert radiatif d'un ordre de grandeur lorsque leurs diamètre et matériau constitutif sont correctement choisis [3].

Dans le cadre de la seconde étude, les propriétés radiatives de matrices nanoporeuses de silice ont été déterminées expérimentalement sur un large spectre de longueurs d'onde (entre 0,2 et 20 μ m). L'analyse de ces données aux petites longueurs d'onde (d'ordre de grandeur équivalent à celui de l'échelle spatiale de la structure des matrices), a abouti à l'introduction de la notion d'agrégat représentatif de nanoparticules de silice et à la mise au point de modèles spécifiques rendant compte de l'interaction rayonnement-agrégat (figure 2) [4], [5].

Perspectives

Les techniques de modélisation thermique présentées ici constituent une boîte à outils permettant de prédire les propriétés d'ensemble de matériaux hétérogènes à partir de leurs données microstructurales pertinentes. Pour compléter cette approche, nous travaillons à des techniques d'homogénéisation portant sur le transfert thermique couplé conduction-rayonnement.

Références

[1] G. DOMINGUES, D. ROCHAIS, S. VOLZ, "Thermal contact resistance between two nanoparticles", *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, **5**, p. 153-156 (2008).

[2] D. ROCHAIS, G. LE MEUR, G. DOMINGUES, V. BASINI, "Microscopic thermal characterization of HTR particle layers", *Nuclear Engineering and Design*, **238**, p. 3047-3059 (2008).

[3] F. ENGUEHARD, "Multi-scale modeling of radiation heat transfer through nanoporous superinsulating materials", *International Journal of Thermophysics*, **28**, p. 1693-1717 (2007).

[4] F. ENGUEHARD, "Mie theory and the discrete dipole approximation – Calculating radiative properties of particulate media, with application to nanostructured materials", dans *Thermal Nanosystems and Nanomaterials*, édité par S. Volz, Springer, accepté pour publication en mai 2008.

[5] S. LALLICH, F. ENGUEHARD, D. BAILLIS, "Experimental determination and modeling of the radiative properties of silica nanoporous matrices", *ASME Journal of Heat Transfer*, accepté pour publication en novembre 2008.



Figure 2

Spectres de coefficient d'extinction d'une matrice nanoporeuse de silice.

Carrés rouges et verts : spectres expérimentaux. Courbe violette : spectre prévu par la théorie de Mie. Bande et courbe moyenne noires : application de la technique d'approximation dipolaire discrète (DDA) à l'agrégat représentatif montré sur le graphe [5].

MODÉLISATION MULTI-ÉCHELLE DE L'ABLATION DE COMPOSITES CARBONE/CARBONE

G. L. VIGNOLES¹, J. LACHAUD¹, Y. ASPA^{1,2}, M. QUINTARD², J.-M. GOYHENECHE^{1,3}, J.-F. EPHERRE^{1,3}, C. DESCAMPS⁴, F. PLAZANET⁴, N. BERTRAND¹, G. BOURGET¹, F. REBILLAT¹, B. VANCRAYENEST⁵, M. ALRIVIE¹, P. WEISBECKER¹, M. DAGES¹, L. POTDEVIN¹

¹LCTS – LABORATOIRE DES COMPOSITES THERMOSTRUCTURAUX, UMR 5801 UNIVERSITE BORDEAUX 1 – CNRS-CEA-SPS, ² IMFT – INSTITUT DE MECANIQUE DES FLUIDES DE TOULOUSE – UMR 5502 INPT-UPS- CNRS TOULOUSE, ³CEA-CESTA, ⁴SPS – SNECMA PROPULSION SOLIDE , LE HAILLAN, ⁵ VKI – VON KARMAN INSTITUTE FOR FLUID DYNAMICS, RHODE-ST-GENESE, BELGIQUE

> ▲ 'ablation de matériaux composites carbone/carbone est étudiée expérimentalement, analytiquement et numériquement du point de vue du matériau. Les résultats montrent que les rugosités obtenues sont fonction des contrastes de réactivité entre constituants et de la compétition diffusion/réaction hétérogène. Nous évaluons les morphologies et les vitesses effectives de recul dans toutes sortes de situations.

L'ablation des composites carbone-carbone (C/C), employés comme écrans thermiques d'objets spatiaux, entraîne une forte modification de l'état de surface de ces matériaux. Les interactions entre les C/C et leur environnement sont très dépendantes de cet état de surface, et réciproquement. Par exemple, le transfert de chaleur peut être fortement augmenté lorsqu'une surface devient rugueuse, ce qui accélère beaucoup sa vitesse de récession. Actuellement, cet aspect n'est pris en compte qu'à travers des corrélations expérimentales à l'échelle macroscopique.

Nous modélisons ici [1] l'interaction matériau / environnement, ainsi que ses conséquences sur l'état de surface, en considérant diverses échelles ($du \ \mu m \ au \ cm$), et en prenant en compte les hétérogénéités du matériau ainsi que la compétition entre transferts interfacial et volumique (*masse et chaleur*). Les résultats sont corrélés avec des caractérisations morphologiques sur des échantillons testés essentiellement au jet de plasma d'arc.



Figure 1 Tableau récapitulant les principaux motifs présents sur les surfaces ablatées de matériaux carbonés.

Méthode

Figure 2

Une description pertinente des matériaux a d'abord été effectuée : échelles, détails de structure, morphologie, etc. La figure 1 résume les divers types de morphologie rencontrés, dont certains sont liés aux hétérogénéités de structure. Ensuite, une simulation directe, analytique [2], [3] ou par diverses méthodes numériques [4], permet de montrer qu'une morphologie stationnaire est toujours atteinte ; les temps caractéristiques de l'état transitoire sont calculés. Les résultats peuvent être interprétés en termes d'interaction matériau / extérieur (flux moyens échangés, état stationnaire atteint...) et d'évolution de la rugosité. Nous pouvons ainsi effectuer des identifications de paramètres physico-chimiques directement à partir des morphologies stationnaires d'ablation. Réciproquement, ces paramètres étant supposés connus, il est possible de prévoir une rugosité stationnaire et une réactivité effective.

Résultats

L'approche a été validée vis-à-vis d'expériences faites au LCTS [5] dans des conditions très bien maîtrisées : nous retrouvons à la fois les vitesses effectives de perte de masse et les morphologies de surface à différents instants (figure 2). De très nombreuses rugosités sont reproduites par la modélisation numérique (figure 3). Enfin, on peut maintenant évaluer la réactivité effective d'un composite à partir de ses constituants, dans divers régimes physico-chimiques et à différents moments de son évolution (de la surface initialement plate jusqu'à sa morphologie stationnaire). Le rôle protecteur des phases les plus résistantes est démontré uniquement dans certaines conditions ; pour d'autres, c'est la loi du "maillon faible" qui prévaut. Cette approche, sans équivalent dans la littérature, a été valorisée auprès des partenaires CEA et Snecma Propulsion Solide en tant qu'aide à la conception de protections thermiques hautes performances.





Références

[1] G. L. VIGNOLES, J. LACHAUD, Y. ASPA, J.-M. GOYHE-NECHE, "Ablation of carbon-based materials: Multiscale roughness modelling", *Composites Science and Technology* (2008), DOI:10.1016/j.compscitech.2008.09.019.

[2] G. DUFFA, G. L. VIGNOLES, J.-M. GOYHENECHE, Y. ASPA, "Ablation of carbon-based materials : investigation of roughness set-up from heterogeneous reactions", *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, **48**, p. 3387-3401 (2005).
[3] J. LACHAUD, Y. ASPA, G. L. VIGNOLES, "Analytical modeling of the steady state ablation of a 3D C/C composite", *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, **51**, p. 2614–2627 (2008). [4] J. LACHAUD, G. L. VIGNOLES, "A Brownian Motion simulation technique to simulate gasification and its application to ablation", *Computational Materials Science*, 44, p. 1034-1041 (2009).

[5] J. LACHAUD, N. BERTRAND, G. L. VIGNOLES, G. BOURGET, F. REBILLAT, P. WEISBECKER, "A theoretical/experimental approach to the intrinsic oxidation reactivities of C/C composites and of their components", *Carbon*, **45**, p. 2768-2776 (2007).



Rugosité = f (taille grains)

Figure 3

Reproduction par modélisation numérique de diverses morphologies de matériaux ablatés dans différentes conditions.

SYNTHÈSE DE MOLÉCULES TRICYCLIQUES POLYRZOTÉES ÉNERGÉTIQUES

C. NYFFENEGGER*, E. PASQUINET*, F. SUZENET*, D. POULLAIN*, G. GUILLAUMET** *CEA - LE RIPAULT, **INSTITUT DE CHIMIE ORGANIQUE ET ANALYTIQUE, UNIVERSITE D'ORLEANS, UMR CNRS 6005, LRC CEA M09

Dans le cadre de la recherche de nouvelles molécules énergétiques insensibles, nous décrivons la synthèse d'architectures tricycliques polyazotées condensées. Dans un premier temps, divers précurseurs bicycliques ont été obtenus par réaction entre deux cycles aromatiques azotés. La cyclisation de ces bicycles par formation de liaison N-N a donné accès à des tricycles riches en azote contenant un triazole ou un pyrazole comme cycle central. Cette liaison N-N a été formée via une espèce nitrène, générée à partir d'un groupement nitro ou azoture. Cette stratégie convergente apparaît générale et a permis l'obtention de différents systèmes cycliques non décrits jusqu'à ce jour. Elle a mené avec d'excellents rendements à des tricycles énergétiques, fortement azotés et nitrés, présentant des vitesses de détonation calculées allant jusqu'à 7500 m/s.

Les composés tricycliques accolés et fortement azotés sont à même de présenter de fortes densités et enthalpies de formation, ainsi qu'une bonne stabilité, ce qui leur confère des propriétés énergétiques intéressantes. Celles-ci sont destinées à des applications dans le domaine de la propulsion, des explosifs et des générateurs de gaz. La stratégie qui a été adoptée est la création d'un troisième cycle à partir d'une entité en contenant déjà deux. Plus précisément, le cycle central est formé par création d'une liaison entre un site réactif (*un atome d'azote*) d'un des cycles externes et un nitrène présent sur l'autre cycle (*figure 1*). Le nitrène est une espèce chimique particulière, instable et donc très réactive, qui peut être généréé à partir de différents groupements chimiques azotés, notamment le groupre nitro (NO_2) ou azoture (N_3). De telles réactions ont été étudiées en série biaryle et phénylhétaryle par les équipes de *Cadogan* et *Abramovitch* [1], [2]. Cependant très peu d'exemples relatent des cyclisations à partir d'un précurseur bis(hétérocyclique) [3], [4], [5]. De plus ils mènent toujours à des tétracycles.

Validation de la méthodologie

Dans un premier temps, nous avons envisagé la synthèse de bicycles nitrés, plus facilement accessibles que les dérivés azoturés correspondants. Les précurseurs nitrés ont été synthétisés par couplage entre deux entités monocycliques, puis mis en réaction avec un agent désoxygénant (*le triéthylphosphite*) pour générer le nitrène. C'est ce nitrène qui subit ensuite la cyclisation (*figure 2*).



Cette réaction s'effectue avec une totale chimiosélectivité en faveur de la formation de liaison N-N. Notamment, nous n'observons pas de composés venant d'une cyclisation C-N, bien que cette réaction parasite ait été rencontrée sur des structures analogues. Notons que l'utilisation d'une activation par les micro-ondes accélère considérablement la conversion et permet la formation des tricycles attendus avec des rendements élevés en quelques minutes (de l'ordre de 80 %). La faisabilité de la cyclisation a ainsi été démontrée pour la synthèse de tricycles contenant, comme cycle central, un cycle à 5 chaînons et 2 ou 3 atomes d'azote [6]. Ces structures originales ont été confirmées par diffraction des rayons X. Le nombre important d'exemples de composés obtenus (plus de 10 sur les 2 séries) atteste de la généralité de cette méthodologie, qui tolère la présence de différents groupes fonctionnels sur les noyaux aromatiques azotés.

Application à la synthèse de molécules énergétiques

Cette méthodologie a ensuite été étendue à la synthèse de molécules plus azotées et fonctionnalisées présentant un potentiel énergétique supérieur. Pour cela, des conditions de cyclisation ne nécessitant pas d'agent désoxygénant ont été validées à partir de précurseurs bicycliques azoturés, ce qui a permis d'envisager la cyclisation de bicycles comportant des groupements nitro (groupements explosophores). Ainsi, des précurseurs riches en azote ont été synthétisés par couplage entre un dérivé cyclique portant un ou des groupes nitro (NO_2) et un dérivé portant un groupe azoture (N_3). Ces précurseurs, soumis à une thermolyse (*chauffage dans un solvant à température élevée*), cyclisent en quelques heures (*figure 3*) [7].

CONCLUSION

Les tricycles nitrés cités plus haut possèdent des propriétés énergétiques intéressantes, avec des vitesses de détonation calculées allant jusqu'à 7500 m/s. Ces bons résultats offrent donc des perspectives importantes dans le domaine de la synthèse de nouvelles molécules énergétiques. En effet, une optimisation de ces structures tricycliques pourrait mener à des composés originaux très performants et peu sensibles. Cette optimisation peut être envisagée essentiellement selon deux axes : 1) utilisation de dérivés azoturés encore plus azotés et/ou nitrés ; 2) introduction de groupes explosophores supplémentaires sur les structures tricycliques par formation de sels énergétiques.

Références

 J. I. G. CADOGAN, M. CAMERON-WOOD, R. K. MACKIE, R. J. G. SEARLE, "The reactivity of organophosphorus compounds. Part XIX. Reduction of nitrocompounds by triethyl phosphite: a convenient new route to carbazoles, indoles, indazoles, triazoles, and related compounds", *J. Chem. Soc.*, p. 4831-4837 (1965).
 R. A. ABRAMOVITCH, J. KALINOWSKI, "Synthesis of Substituted Pyrido[1,2-b]indazoles", *J. Heterocycl. Chem.*, p. 857-861 (1974).

[3] R. Y. NING, P.B. MADAN, L. H. STERNBACH, "Carbon-nitrogen vs nitrogen-nitrogen bond formation in nitrenoid cyclization reactions. Pyrolysis of 3-azido-4-(2-pyridyl) carbostyrils", *J. Org. Chem.*, **38**, p. 3995-3998 (1973).

[4] A. MAQUESTIAU, M. FLAMMANG-BARBIEUX,
E. VILAIN, "Synthèse et réactivité du [3,2-b]pyridino
[4,5]benzo-1,3a,6,6a-tetraazapentalene", *Bull. Soc. Chim. Belg.*, *92*, p. 67-75 (1983).

[5] A. MAQUESTIAU, R. BIEMANS, M. FLAMMANG-BAR-BIEUX, E. VILAIN, "Synthèse de pyridinobenzotetraazapentalenes", *Bull. Soc. Chim. Belg.*, **95**, p. 1107-1116 (1986).

[6] C. NYFFENEGGER, E. PASQUINET, F. SUZENET, D. POULLAIN, C. JARRY, J.-M. LEGER, G. GUILLAUMET, "An efficient route to polynitrogen-fused tricycles via a nitrene-mediated N–N bond formation under microwave irradiation", *Tetrahedron*, 64, p. 9567-9573 (2008).
[7] C. NYFFENEGGER, E. PASQUINET, F. SUZENET, D. POULLAIN, G. GUILLAUMET, "Synthesis of nitrofunctionalized polynitrogen tricycles bearing a central 1,2,3-triazolium ylide", *Synlett.*, acceptée pour publication (2009).



Figure 3

Synthèse de tricycles optimisés, fonctionnalisés par des groupes explosophores.

DISCRIMINER UN ESSRI NUCLÉRIRE D'UN ÉVÈNEMENT NUCLÉRIRE CIVIL

G. LE PETIT, P. ACHIM, P. HEINRICH, Y. GRILLON, X. BLANCHARD, P. ARMAND CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE

Depuis la signature par la France du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (TICE), le CEA-DAM participe à la mise en place d'un réseau mondial de capteurs incluant la détection de radionucléides qui seraient produits lors d'un essai nucléaire. Pour un essai souterrain confiné, seuls les gaz nobles sont susceptibles d'être relâchés dans l'atmosphère du fait de leur très faible interaction avec le milieu de confinement. Parmi ces gaz nobles, quatre isotopes radioactifs du xénon permettent de discriminer entre un essai nucléaire et un évènement civil. La mesure de ces radioxénons, notamment des rapports isotopiques, associée à la modélisation du transport atmosphérique, permet de conforter avec un bon niveau de confiance cette discrimination.



Le CEA-DAM a développé un dispositif nommé Spalax[®] (système de prélèvement automatique avec l'analyse du xénon [1]) entièrement automatisé. Le dispositif extrait et purifie le xénon à partir d'un prélèvement d'air (80 m³), le concentre d'un facteur supérieur à 10⁶ pour



Figure 1

Détermination des activités des isotopes métastables ^{131m}Xe et ^{133m}Xe par la méthode du maximum de vraisemblance (axes X et Y : activités estimées de ^{131m}Xe et ^{133m}Xe respectivement, axe Z : probabilité conjointe des deux radioxénons). fournir un volume de 25 cm³, et mesure la quantité de radioxénons par une spectrométrie d'émission X et γ . La limite de détection obtenue pour l'isotope ¹³³Xe est de 0,15 mBq/m³. L'analyse de l'échantillon d'air, prélevé et traité par Spalax[®], exploite simultanément l'ensemble de l'information spectrale caractérisant les quatre radioxénons : raies γ résultant de la désintégration etaet raies X résultant de la conversion interne pour les isotopes (métastables) ^{131m}Xe (demi-vie : 11,9 jours) et ^{133m}Xe (2,2 jours); raies γ résultant de la désintégration β pour les isotopes ¹³³Xe (5,3 jours) et ¹³⁵Xe (9,1 heures). Un traitement statistique spécifique des données permet d'obtenir le meilleur estimateur des activités des différents radioxénons par la détermination des maximums de vraisemblance. La figure 1 donne un exemple de résultats obtenus pour les isotopes métastables ^{131m}Xe et ^{133m}Xe. L'association du dispositif Spalax[®] et de cette méthode de traitement permet d'obtenir des activités minimales détectables du même ordre de grandeur pour les quatre radioxénons.

La discrimination d'un évènement nucléaire

La mesure de plusieurs isotopes radioactifs du xénon donne accès à des rapports isotopiques susceptibles de discriminer un évènement nucléaire. À titre d'exemple un rapport isotopique ${}^{135}Xe/{}^{133}Xe > 0,2$ ou ${}^{133m}Xe/{}^{133}Xe > 0,06$, mesuré trois jours après un rejet atmosphérique, serait caractéristique d'un essai. En parallèle, à partir de l'origine de la détection, une chaîne de modélisation du transport atmosphérique permet d'estimer le rejet en termes de localisation et de quantité de xénon émise.

Ces informations permettent de consolider la discrimination et de vérifier la cohérence entre les niveaux d'activité émis et la nature de l'évènement. Par exemple, les quantités de ¹³³Xe rejetées par une centrale nucléaire sont de l'ordre de quelques GBq (10⁹ Bq), de quelques TBq (10¹² Bq) pour une usine de production d'isotopes à usage médical, tandis que la quantité instantanée relâchée lors d'un essai serait de l'ordre du PBq (10¹⁵ Bq) [2], [3].

Recherche des sources potentielles par modélisation du transport atmosphérique

Pour répondre au besoin de localisation, le CEA-DAM utilise des modèles météorologiques couplés à des modèles lagrangiens de simulation du transport atmosphérique. L'exécution des codes de calcul sur de longues périodes temporelles et / ou sur des domaines d'études de grandes étendues spatiales, nécessite des moyens adaptés, comme les machines massivement parallèles du CCRT.



Figure 2

Rétro-propagation d'un panache depuis le CEA–DAM - Île-de-France (*DIF*) se dirigeant vers le site industriel de Fleurus (*Belgique*). Triangles noirs : stations Spalax. Cercle noir : Fleurus. Ronds bleus : centres nucléaires de production d'électricité. Les simulations sont réalisées en mode direct ou en mode rétrograde. Dans le cas où les caractéristiques de la source sont connues, le mode direct consiste à calculer l'évolution temporelle et la répartition spatiale des rejets issus de cette source. Dans les cas où nous ne disposons que de mesures sur des capteurs, le problème consiste à rechercher la source (*spatialement et temporellement*) en inversant le temps. Dans cette méthode, une rétroespèce est émise depuis le détecteur qui a fait la mesure, et son évolution est suivie en remontant le temps. Les zones géographiques survolées par le rétro-panache sont autant de localisations potentielles pour le rejet. Nous estimons alors les termes sources nécessaires pour conduire à la mesure.

La figure 2 illustre la recherche par rétro-transport de sources à l'origine d'une détection de ^{133}Xe au CEA–DAM Île-de-France en novembre 2004. Pour cette détection le rapport $^{135}Xe/^{133}Xe$ était de l'ordre de 10^{-2} , donc compatible avec des rejets civils. La source la plus probable est l'usine de production de radionucléides située à Fleurus (*Belgique*). Le rapport isotopique calculé et le terme source estimé par la simulation (*20 à 30 TBq*) sont compatibles avec les rejets atmosphériques autorisés pour cette installation.

Conclusion

Le système Spalax[®] associé à une mesure performante des isotopes radioactifs du xénon et le couplage avec un modèle de transport atmosphérique permettent de fournir une expertise fiable, notamment dans le cas d'évènement du type nord-coréen survenu en octobre 2006, ou de la surveillance de pays ou d'installations suspectes.

Références

 J.-P. FONTAINE, F. POINTURIER, X. BLANCHARD,
 T. TAFFARY, "Atmospheric xenon radioactive isotope monitoring", *Journal of Environmental Radioactivity*, **72**, p. 129-135 (2004).

[2] G. LE PETIT, R. CHIAPPINI, T. TAFFARY, J.-P. FONTAINE, "Analyse des radioxénons atmosphériques par une spectrométrie d'émission X- γ ", chocs, **35**, p. 32-41 (2007).

[3] G. LE PETIT, P. ARMAND, G. BRACHET, T. TAFFARY, J.-P. FONTAINE, P. ACHIM, X. BLANCHARD, J.-C. PIWOWARCZYK, F. POINTURIER, "Contribution to the development of atmospheric radioxenon monitoring", *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, **276**, p. 391-398 (2008).

VERS UNE MODÉLISATION PLUS RÉALISTE DES PERFORMANCES DU RÉSERU INFRASON DU TICE

A. LE PICHON, J. VERGOZ, E. BLANC CEA – DAM – ÎLE-DE-FRANCE

Les premières cartes globales déterminant les performances du réseau infrason de vérification du TICE (Traité d'interdiction complète des essais nucléaires) ont été établies dans les années 1990. Il a fallu cependant attendre les mesures récentes du bruit réel, fournies par les stations de plus en plus nombreuses du réseau et les derniers modèles de vent, pour obtenir des cartes plus réalistes. En parallèle, il est maintenant possible de valider les simulations à partir de la mesure d'événements de référence. Ces études constituent un enjeu majeur pour le TICE, mais aussi pour une communauté scientifique plus large qui prend conscience du potentiel de ce réseau global pour la surveillance de l'environnement et l'étude de la dynamique de l'atmosphère.

Une meilleure connaissance des modèles atmosphériques

Les premières cartes donnant les performances du réseau infrason du TICE ont permis de déterminer le nombre optimal et la position des stations pour détecter et localiser des explosions aériennes avec un seuil de 1 *kt (en équivalent TNT)*. Le calcul de ces cartes reposait alors sur des modèles empiriques de bruit de fond et des modèles de vents stratosphériques mensuels moyennés, ainsi que des lois empiriques d'atténuation déduites des mesures des essais nucléaires français [1].

Avec la mise en place du réseau infrason, les calculs de ses performances ont été améliorés par les mesures de bruit de fond effectuées dans chaque station. Les modèles empiriques de vent en altitude de type *Horizontal Wind Model* (HWM) jusqu'alors utilisés, sont basés sur des données expérimentales moyennées. Les perturbations météorologiques sont maintenant bien mieux décrites par des modèles opérationnels de prédiction. En particulier, le modèle *European Center of Medium-Range Weather Forecast* (ECMWF) délivre des profils de plus haute résolution qui permettent de simuler plus finement les performances d'un réseau de détection [2].

Simulation des performances globales

La figure 1 a illustre les performances actuelles du réseau qui détecte en permanence et à une échelle globale des signaux essentiellement générés par la houle océanique. Aux périodes de solstices d'hiver et d'été, les vents dominent dans la stratosphère avec des vitesses supérieures à 100 m/s. En hiver, ils sont orientés vers l'est dans l'hémisphère nord et vers l'ouest dans l'hémisphère sud. Aux équinoxes de printemps et d'automne, les vents s'atténuent avant de s'inverser. Pour l'ensemble des stations, le nombre de détections croît quand la propagation s'effectue dans la direction des vents dominants (*figure 1b*). Ces grands courants de circulation atmosphérique contrôlent ainsi directement les capacités de détection du réseau avec des performances améliorées en hiver et en été.

La figure 2 compare les capacités de détection du réseau global prédites avec le modèle *ECMWF*. Afin de localiser une source explosive, l'énergie minimale détectable par deux stations a été calculée avec des niveaux de bruit réalistes. Ces simulations confirment les observations en prédisant une oscillation biannuelle des seuils induite par les inversions saisonnières des vents stratosphériques *(figure 1)*.

Une validation expérimentale

Le 15 mars 2008, à une quinzaine de kilomètres de Tirana (*Albanie*), un dépôt de munitions a explosé accidentellement faisant un cratère de 30 m de profondeur. Les infrasons produits ont été enregistrés jusqu'à Zalesovo en Russie (*figure 3*). Pour chaque station, les seuils de détection sont calculés à partir du rapport des amplitudes prédites des signaux et des bruits de fond mesurés. Ils permettent d'expliquer des différences importantes dans les niveaux de réception des signaux en tenant compte des effets conjugués des conditions de propagation et du bruit de fond.



Figure 1

Performance actuelle du réseau infrason du TICE.

a Ensemble des signaux détectés sur 36 stations opérationnelles aujourd'hui, ordonnées par latitudes croissantes.

Le cumul du nombre de détections est présenté en fonction de la période de l'année en différenciant les sources situées à l'ouest et à l'est des stations. L'échelle de couleur code la variation annuelle de la vitesse du vent dans la stratosphère et démontre la corrélation entre détections et vents dominants.

b Cartes d'énergie minimale détectable avec le modèle HWM, en supposant un niveau de bruit uniforme de 0,02 Pa. Les triangles rouges représentent les stations. L'échelle de couleur code le seuil de détection par station.



Figure 2

Variabilité annuelle du seuil de détection à deux stations, dans la bande de fréquence 0,2-2 Hz. Le code couleur correspond à des sources situées dans différentes tranches de latitude. Le trait noir discontinu indique le seuil de 1 kt.



Figure3

Carte d'atténuation pour l'explosion d'Albanie (étoile jaune).

Le code couleur indique l'amplitude prédite des signaux pour une énergie estimée à 1 kt. Pour toutes les stations ayant détecté un signal (triangles verts), le rapport signal sur bruit prédit est supérieur à 0,5.

Ces nouvelles simulations confirment les capacités du réseau global à détecter et localiser une source explosive d'une énergie minimale de 1 *kt*. Elles montrent aussi une très grande variabilité spatiale et temporelle de ses performances. La principale limite de ces simulations repose sur l'usage de lois d'atténuation empiriques qui réduisent la complexité de la propagation. Celles-ci pourront être perfectionnées en utilisant des codes opérationnels de simulation pour tendre vers des cartes de plus en plus précises, à l'image des derniers modèles atmosphériques utilisés. Ces outils permettront de décider, à une date donnée, d'une configuration optimale de stations pour surveiller une région d'intérêt.

Références

[1] E. BLANC, J. L. PLANTET, "Detection capability of the IMS infrasound network: a more realistic approach", *Proceedings of the Infrasound workshop for CTBT monitoring*, Bruyères-le-Châtel, France, (1998).

[2] A. LE PICHON *et al.*, "Assessing the performance of the International Monitoring System infrasound network: Geographical coverage and temporal variabilities", *J. Geophys. Res.*, doi:10.1029/2008JD010907 (2009).

Prix scientifiques

Le Prix "La Recherche" 2008, mention Énergie, décerné par le magazine La Recherche, a été attribué, pour leurs travaux sur les accélérateurs laser-plasma, . conjointement à Victor Malka, directeur de recherche au CNRS, à Jérôme Faure, chargé de recherche au CNRS, deux chercheurs du Laboratoire d'optique appliquée et à Erik Lefebvre, chef du Laboratoire interaction rayonnement matière du centre CEA - DAM - Île-de-France. Les faisceaux d'électrons créés par laser possèdent des propriétés uniques qui les rendent utiles pour de nombreuses applications, dans des domaines tels que les sciences du vivant (radiothérapie et radiobiologie) et les sciences des matériaux (radiographie non destructive de la matière dense) et permettent d'envisager leur utilisation pour l'étude de schémas de laser à électron libre compact pour la production de faisceaux X intenses.



La Société de mathématiques appliquées et industrielles (*SMAI*) a décerné deux prix pour des travaux sur le transfert radiatif, dont l'un à **Jean-François Clouët** du CEA - DAM - Île-de-France. Ce prix récompense une série de publications dans des revues scientifiques sur la modélisation physico-numérique du transport des photons.

Véronique Ferlet-Cavrois, Jacques Baggio et Philippe Paillet (*CEA - DAM - Île-de-France*) ont obtenu pour la quatrième fois consécutive le prix du meilleur papier à la conférence *NSREC* 2008 (Nuclear and Space Radiation Effects Conference). Ce travail, réalisé en collaboration avec le Sandia National Laboratory (*USA*), montre que des irradiations aux protons ou aux neutrons peuvent induire des nouveaux modes de dégradations sur des composants de puissance, même pour des fluences très faibles. Cette distinction conforte la DAM dans son rôle d'expert dans le domaine du durcissement des composants électroniques en environnement radiatif.

Prix Science et Défense

Il a été attribué à **Jean-Paul Périn** pour ses travaux sur la cryogénie réalisés dans le cadre du projet Laser Mégajoule. Jean-Paul Périn, directeur de recherche à la Direction des sciences de la matière *(CEA-DSM)* et assistant du directeur du programme Simulation de la DAM, a élaboré, avec son équipe, un programme de R&D permettant de maîtriser l'ensemble des techniques cryogéniques nécessaires aux expériences qui seront réalisées sur le LMJ. Le prix lui a été remis par le Ministre de la Défense, Hervé Morin, le 17 décembre.

Prix du meilleur poster

Le Groupe français de la céramique a attribué, pour la 2^e année consécutive, à **Anne-Cécile Bravo** du CEA - le Ripault, le prix du meilleur poster pour son étude "Élaboration de céramiques transparentes de Yb : Sc₂O₃ pour application laser à partir de poudres préparées par voie céramique traditionnelle ou par chimie douce".

Le prix du meilleur poster a été décerné à **Frédéric Rambaud** du CEA - Le Ripault lors des journées de la Société Française de Chimie à Limoges pour ses travaux concernant le développement de matériaux hybrides organique/inorganique mésostructurés élaborés par voie sol-gel.

Lors de la Winter Conference on Plasma Spectrochemistry qui s'est tenue à Temecula (USA), Sylvain Topin, doctorant au CEA - DAM - Île-de-France, a reçu le prix du meilleur poster décerné par la revue Analytical and bioanalytical chemistry. Ses travaux portent sur la spéciation du plutonium en milieu environnemental par le couplage électrophorèse capillaire - torche à plasma - spectrométrie de masse.

Distinction

Luc Bergé, directeur de recherche au CEA - DAM - Île-de-France, a été élu "Fellow" de la Société américaine d'optique pour ses travaux sur l'auto-focalisation optique, en particulier le collapse d'ondes, la filamentation et la compression d'impulsions ultracourtes.

