



energie atomique • energies alternative.

sommaire

2 ÉDITORIAL

T. MASSARD

ÉLECTROMAGNÉTISME

4 Optimisation de sources X intenses de type Z-pinch couplées au générateur fort courant SPHINX H. CALAMY, F. LASSALLE, J. GRUNENWALD, F. ZUCCHINI

INTERACTION LASER - MATIÈRE

- 6 Phénomènes d'accrétion magnétique en astrophysique de laboratoire : projet POLAR E. FALIZE, B. LOUPIAS, J.-P. LEIDINGER, C. BUSSCHAERT, A. RAVASIO, M. KOENIG, A. DIZIÈRE, C. D. GREGORY, C. MICHAUT, C. CAVET
- 8 Sources térahertz créées par des impulsions ultrabrèves

L. BERGÉ, I. BABUSHKIN, W. KUEHN, K. REIMANN, M. WOERNER, J. HERRMANN, T. ELSAESSER, C. KÖHLER, S. SKUPIN

- **10** Modélisation microscopique de la diffusion Raman D. BÉNISTI, O. MORICE, L. GREMILLET, D. STROZZI
- 12 Cible d'ignition et instabilités laser-plasma S. LAFITTE. P. LOISEAU
- 14 Amplification paramétrique d'une impulsion à dérive de fréquence dans une fibre optique E. HUGONNOT, D. BIGOURD, L. LAGO, A. MUSSOT, A. KUDLINSKI, M. DOUAY
- 16 Conversion de fréquence pour les chaînes laser de fortes puissances du futur G. MENNERAT, O. BONVILLE, D. LUPINSKI
- 18 Endommagement laser multi-longueur d'onde des cristaux de KDP S. REYNÉ, G. DUCHATEAU, J.-Y. NATOLI, L. LAMAIGNERE

PHYSIQUE DES PLASMAS

20 Modélisation thermo-statistique des plasmas corrélés J.-C. PAIN, G. DEJONGHE

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

- 22 Courbe de fusion du tantale : la fin d'une controverse A. DEWAELE, P. LOUBEYRE
- 24 Équation d'état de l'hydrogène du solide moléculaire au plasma très dense L. CAILLABET, S. MAZEVET, P. LOUBEYRE
- 26 Modélisation des transitions de phase matensitiques par champ de phase avec chemins de réaction C. DENOUAL, A.-M. CAUCCI, L. SOULARD, Y.-P. PELLEGRINI

Chocs Avancées

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

28 Collectivité nucléaire avec l'interaction de Gogny pour 1700 noyaux J.-P. DELAROCHE, M. GIROD, H. GOUTTE, S. HILAIRE, S. PÉRU, N. PILLET, J. LIBERT, G.F. BERTSCH

PHYSIQUE DE L'ATMOSPHÈRE

30 Surveillance à grande distance des éruptions volcaniques R. S. MATOZA, A. LE PICHON, J. VERGOZ, P. HERRY, J.-M. LALANDE, H. LEE, I. CHE, A. RYBIN

INSTRUMENTATION & MÉTROLOGIE

- 32 Caractérisation des phénomènes de striction en dynamique ultra-rapide à l'aide d'une caméra unique G. BESNARD, J.-M. LAGRANGE, F. HILD, S. ROUX, CH.VOLTZ
- 34 Contrôle des effets des radiations dans les fibres optiques phosphosilicates : exemples d'applications dans différents domaines du nucléaire S. GIRARD, C. MARCANDELLA, N. RICHARD, G. ORIGLIO, M. VIVONA, Y. OUERDANE, A. BOUKENTER, M. CANNAS, R. BOSCAINO, B. CADIER, T. ROBIN, A. LAURENT, S. QUENARD, N. AUTHIER
- Sensibilité aux radiations des composants électroniques avancés : effet de l'énergie des ions lourds
 M. RAINE, P. PAILLET, M. GAILLARDIN, J.-E. SAUVESTRE, G. HUBERT, A. BOURNEL

SCIENCE DES MATÉRIAUX

- 38 Diagnostics optiques et modélisation du procédé de projection plasma de nanomatériaux en voie liquide E. MEILLOT, D. DAMIANI, C. CARUYER, S. VINCENT, J.-P. CALTAGIRONE
- 40 Modules d'élasticité du béryllium en fonction de la température M.-H. NADAL, L. BOURGEOIS, F. CLÉMENT, G. RAVEL-CHAPUIS

CALCUL NUMÉRIQUE

42 Topologie et maillage hexaédrique F. LEDOUX, J.-CH. WEILL

CHIMIE

- 44 Synthèse et greffage d'un dérivé de bis-triazinyl-pyridine (BTP) sur une microbalance à quartz; application à la détection de lanthanides
 A. WUILLAUME, D. MERCIER, C. METHIVIER, C. M. PRADIER, N. LECONTE, F. SUZENET, G. GUILLAUMET
- **46** Développement d'un détecteur de vapeurs d'explosifs T. CARON, S. CLAVAGUERA, M. GUILLEMOT, M. BOUHADID, F. PARRET, F. VEIGNAL, E. PASQUINET, P. MONTMÉAT, P. PRENÉ, L. HAIRAULT, F. PERRAUT

48 PRIX ET DISTINCTIONS, SOUTENANCES HDR



Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Chocs Avancées 2010, Avancées scientifiques et techniques de la Direction des applications militaires.

Image de couverture : vue artistique représentant des plaques de verre laser dopé au néodyme équipant la Ligne d'intégration laser (LIL) et le futur Laser Mégajoule (LMJ) au centre du CEA / CESTA en Gironde. © D. Sarraute/CEA

Directeur de la publication : Thierry MASSARD. Coordinateur scientifique : Philippe BELLEVILLE. Comité scientifique : Philippe BELLEVILLE, Daniel BOUCHE, Pierre BRUGUIERE, Gilles DAMAMME, Philippe DUVIGNAC, Francis HARDOUIN, Christophe LELOUP, Jean-Pierre LEYRAT, Stéphane LOUBIÈRE, Christophe MOULIN, Bruno SCHEURER, Rémi SENTIS, Philippe SIMONETTI, Christophe THIÉBAUT, Catherine TREIMANY. Rédacteur en chef: Michel BOIVINEAU.

Création et réalisation : EFIL / www.efil.fr. Impression : Gibert & Clarey, Chambray-lès-Tours. Secrétariat, diffusion et abonnement : Régis VIZET.

CEA-DAM Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé) Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon cedex Tél: 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax: 33 (0)1 69 26 70 80 E-mail: chocs@cea.fr



éditorial



Par Thierry Massard Directeur scientifique de la direction des applications militaires du CEA

2010, une année riche pour la DAM

Avancées est la vitrine des activités de recherche publiées par la DAM. Parmi l'ensemble des publications de l'année 2010, nous avons sélectionné celles qui nous semblent les plus représentatives des orientations de nos recherches amont. C'est toujours un grand plaisir pour moi d'introduire ce numéro annuel d'*Avancées*, mais c'est aussi une tâche bien difficile que de sélectionner une vingtaine de publications représentatives de la production scientifique de la DAM, tant celle-ci recèle de nombreux articles de haut niveau dans des domaines extrêmement variés. Merci au comité de sélection pour ce travail ô combien délicat !

Difficile donc d'être exhaustif, difficile également de donner à travers ce numéro un contour complet des travaux de la DAM en 2010. Pourtant, le cru 2010 est à plusieurs titres exceptionnel. Tout d'abord parce que la DAM, depuis le 1^{er} janvier 2010, compte un centre de plus avec le CEA-Gramat, ce qui renforce notre compétence scientifique et technique dans les domaines de l'électromagnétisme, la détonique et la simulation de l'effet des armes. L'article sur l'installation Sphinx capable de produire des sources de rayons X intenses, illustre bien ces nouvelles compétences qui s'agrègent au



TERA100, premier ordinateur européen au-delà de 1 petaflops. PHOTO CENTADAM

savoir de la DAM sur la conception et l'exploitation des grandes installations scientifiques.

On ne saurait oublier dans les évènements qui ont marqué la DAM la mise en route du supercalculateur TERA100. Premier ordinateur européen de la classe pétaflopique, TERA100 est le fruit d'une recherche partenariale de très haut niveau avec les meilleurs industriels européens. Cette machine, unique par ses capacités à gérer des très grandes masses de données, illustre bien la volonté de la DAM de mener les meilleurs travaux dans le domaine de la simulation numérique, tout en restant un acteur de premier plan sur les grands instruments de physique. Une confrontation permanente entre expérience et modélisation qui ouvre ainsi des portes nouvelles sur la connaissance de la matière dans tous ses états !

2010 fut, on s'en souvient, l'année du laser, nous rappelant à tous l'invention du laser par Charles Townes et Théodore Maiman, il y a cinquante ans. La DAM, à la fois concepteur et opérateur d'un des plus grands lasers mondiaux, a marqué cette année du laser par de nombreuses manifestations dont la plus emblématique a certainement été la venue du Président de la République française



PHOTO P. LABEGUERIE

Visite du Laser Mégajoule par le Président de la République à l'occasion des 50 ans du Laser.



PHOTO CEA/CAD

sur le site de construction du Laser Mégajoule au CESTA. Quelques articles de ce numéro illustrent l'excellence de la DAM dans le domaine des technologies lasers et des expérimentations plasmas associées. Grâce à l'installation LIL, la DAM progresse dans la maitrise de la physique des plasmas, propose et prépare les futures expériences de fusion pour le Laser Mégajoule.

La communauté scientifique européenne a pris pour les années à venir le pari de réaliser de grandes installations laser, à l'horizon 2020/2030, que ce soit pour l'étude de la lumière extrême avec le projet ELI, ou pour l'étude de la fusion contrôlée pour la production d'énergie propre et durable avec l'installation HiPER. Fort d'une compétence reconnue dans la construction et l'exploitation du laser LIL et bientôt du Laser Mégajoule, ne doutons pas que les compétences des laseristes du CEA seront mises à contribution pour ces projets ambitieux dans les années à venir.

On constatera à travers les articles d'Avancées 2010, que la physique des matériaux est présente dans nombre de recherches de la DAM. C'est une physique qui progresse de façon spectaculaire grâce aux grands instruments de physique mais aussi grâce aux grands moyens de simulation qui permettent de relier les différents niveaux de modélisation de l'échelle atomique à l'échelle macroscopique. Le calcul haute performance nous permettra d'obtenir une description multi-échelle des propriétés physiques des matériaux dans les années à venir.

Enfin, ce numéro n'aurait pu être complet sans y faire un écho à l'Année internationale de la chimie qui s'ouvre en 2011. La chimie est omniprésente à la DAM, que l'on pense à la chimie des matériaux, à la chimie des polymères, la chimie du retraitement des matières nucléaires ou la chimie des radionucléides dans l'environnement. Des thématiques qui couvrent un champ très large de connaissances que nous avons souhaité illustrer par quelques articles dans *Avancées* 2010, notamment dans le domaine des capteurs conçus pour identifier des substances dangereuses dans l'environnement. Au CEA, l'année de la Chimie sera marquée par des manifestations prestigieuses. La première a été le séminaire Chimie de Tours ouvert par madame la Haute-Commissaire à l'Énergie Atomique qui a salué la qualité des recherches de la DAM, et son insertion exemplaire dans le tissu national de la recherche que ce soit avec le CNRS et avec les universités.

Un numéro spécial de la revue *Focus* reprendra les présentations données à cette occasion. Le trait d'union entre laser et chimie, nous l'avons trouvé à la DAM en développant les problématiques sol-gel pour le traitement des optiques très particulières du LMJ.

De la théorie à l'expérience, ce numéro d'*Avancées* est donc par sa variété, par ses thématiques, au cœur de l'actualité scientifique et technique de la DAM. Nous vous en souhaitons une très bonne lecture.

Optimisation de sources X intenses de type Z-pinch couplées au générateur fort courant SPHINX

Le CEA - Gramat a conçu et mis au point un système unique et original pour la production de rayonnements X intenses dans la gamme spectrale du keV. Ces travaux comprennent le développement du générateur de Hautes puissances pulsées (HPP) SPHINX et des sources rayonnantes Z-pinch associées. Le moyen SPHINX est la seule machine Z-pinch au monde conçue à partir de la technologie LTD (Linear Transformer Driver), et délivre une impulsion de courant de 8 MA en 1 μ s, soit un temps de montée 10 fois plus long que les machines Z-pinch employées jusqu'alors. Cet aspect a nécessité une démarche systématique de caractérisation et d'optimisation du couplage générateur-charge Z-pinch. Le présent article présente les différentes étapes de cette démarche d'optimisation et donne les performances obtenues.

H. Calamy • F. Lassalle • J. Grunenwald • F. Zucchini CEA - Gramat

U ne source *Z*-pinch repose sur l'implosion d'un cylindre de matière ionisée par les forces de Lorentz créées par l'injection dans ce cylindre d'une forte impulsion de courant délivrée par un générateur HPP. Le générateur SPHINX permet de produire des rayonnements X intenses dans des gammes spectrales allant des XUV à 10 keV en utilisant des sources tungstène, aluminium ou argon [1]. Pour les deux premières, la charge est constituée initialement par un réseau cylindrique de quelques centaines de fils métalliques fins (diamètre de l'ordre de la dizaine de μ m).

La machine SPHINX (**figure 1**) repose sur la technologie LTD et fait suite au développement au CEA-Gramat [2] d'étages présentant un front de montée de 1 μ s. L'architecture comprend 16 lignes de 10 étages LTD, connectées à la charge terminale au moyen de lignes coaxiales sous vide utilisant l'isolement magnétique. La technologie LTD-1 μ s permet, grâce aux composants faiblement inductifs et résistifs développés (condensateurs et éclateurs), de délivrer une impulsion de courant intense sur une charge de faible impédance, sans dispositif de compression temporelle de l'impulsion. Le seul fluide isolant utilisé est de l'air sec à pression atmosphérique. SPHINX stocke une énergie de 2,2 MJ, délivre 8 MA en 1 μ s sur charge adaptée et est la seule installation *Z*-pinch au monde intégralement basée sur cette technologie LTD. De par ce choix technologique, la machine est ainsi compacte, robuste, modulaire et également plus sûre et plus facile d'emploi (maintenance). La contrepartie réside dans le travail nécessaire de stabilisation de l'implosion des charges *Z*-pinch soumises à ce front de montée long.

Le fonctionnement d'une charge Z-pinch à fil (**figure 2**) est mieux connu depuis le début des années 2000 grâce aux données issues de diagnostics plus performants et à l'apport des simulations numériques en magnétohydro-dynamique (MHD) radiative 3D [3]. La modélisation s'attachant uniquement aux problèmes d'instabilités MHD se développant lors de l'implosion d'un cylindre creux de



Figure 1.



Figure 2. Simulation MHD 3D de l'implosion d'une charge Z-pinch à réseau de fils.

La géométrie des électrodes et la disposition des fils sont présentées. Les isocontours de densité en représentation logarithmique sont scindés en deux parties (5 valeurs de 10^{-4} g/cc à 1 g/cc pour le fond et uniquement les fortes densités 1q/cc pour le reste). Les différentes étapes de l'implosion sont présentées : la situation initiale, l'effet de la phase d'ablation (190 ns) avec la réorganisation du profil de densité, le départ de l'implosion (410 ns) et la phase de stagnation avec la formation de la colonne rayonnante soumise aux instabilités MHD (690 ns).

matière ionisée est insuffisante. L'effet de la phase dite d'initiation (quelques ns) est à prendre en compte : celle-ci crée au niveau de chaque fil un système constitué d'un cœur froid et dense entouré par une couronne de plasma chaud (10 eV) peu dense (10^{-4} à 10^{-5} g/cc). Le courant injecté circule préférentiellement dans la couronne du fait du ratio des résistivités cœur/couronne. Les forces de Lorentz jouent sur la couronne de chaque fil et injectent continuement le plasma de celles-ci vers l'axe du système, tandis que le cœur s'échauffe sous l'effet du rayonnement UV de la couronne nourissant ainsi celle-ci. Cette phase, dite d'ablation, est la plus longue de l'expérience (40 à 70% du temps d'implosion) et organise le profil de densité depuis la position initiale des fils jusqu'à l'axe du système. Une fois ce régime d'ablation terminé, l'implosion proprement dite se déroule et crée sur l'axe une colonne de plasma dense et chaud (densité de quelques g/cc, température électronique de Te = 700 eV), stable pendant 10 à 20 ns (on parle de stagnation) qui libère son énergie sous forme de rayonnement X.

L'optimisation du rendement de conversion de l'énergie stockée en rayonnement X utile (10 à 25 % sur SPHINX) implique une maîtrise du régime d'ablation et des instabilités (Rayleigh-Taylor) durant l'implosion. Pour la production de rayonnement de couche K, il est d'autre part apparu qu'un niveau de développement raisonnable des instabilités était nécessaire : la colonne rayonnante finale consiste ainsi en une succession selon l'axe z de points chauds et denses fortement comprimés où la matière est suffisamment ionisée pour produire le spectre de raie K recherché. L'utilisation conjointe de la simulation numérique et de tests expérimentaux a permis d'identifier les paramètres conditionnant la phase d'ablation et donc l'optimisation du profil de densité limitant le développement des instabilités.

Il était cependant crucial d'obtenir une homogénéité axiale de l'implosion par un travail de contrôle de la phase d'initiation (la fin de celle-ci correspond aux conditions initiales des simulations MHD). Une technique [4], consistant à injecter avant l'arrivée du courant principal une faible impulsion de quelques kA avec un temps de montée de quelques μ s, a été développée pour obtenir un claquage le long des fils avant fusion (claquage lié aux impuretés). Ceci modifie les conditions de contact fils-électrodes et la topologie du champ électrique au niveau du réseau de fils.

Les expériences réalisées avec ce pré-conditionnement conduisent ainsi à des implosions axialement homogènes et à l'augmentation des niveaux de puissances rayonnées d'un facteur 7. Les performances atteintes sont respectivement 500 kJ, 16 TW, 15 ns pour une source *Z*-pinch tungstène (rayonnement < 1 keV) et 28 kJ, 0,6 TW, 25 ns pour une source *Z*-pinch aluminium (rayonnement > 1 keV).

RÉFÉRENCES

[1] F. ZUCCHINI et al., "First argon gas puff experiments with 500 ns implosion time on SPHINX driver", AIP Conf. Proc., 1088, p. 247-250 (2009).

[2] F. LASSALLE et al., "Status on the Sphinx machine based on the microsecond LTD technology", *IEEE Trans. on Plasma Sciences*, **36**(2), Part 1, p. 370-377 (2008).

[3] H. CALAMY et al., "Peculiarities of microsecond wire array Z-pinches on Sphinx machine", *IEEE Trans. Plasma Sciences*, **34**, 2279 (2006).

[4] H. CALAMY *et al.*, "Use of microsecond current prepulse for dramatic improvements of wire array Z-pinch implosion", *Phys. Plasmas*, **15**, 012701 (2008).

Phénomènes d'accrétion magnétique en astrophysique de laboratoire:le projet POLAR

Le projet POLAR est un projet d'astrophysique de laboratoire dont l'objectif est de reproduire les processus de hautes énergies que l'on rencontre dans les variables cataclysmiques magnétiques. Au fait que le rayonnement, la matière et le champ magnétique sont fortement couplés dans ces environnements extrêmes, s'ajoute la difficulté à les observer directement, ce qui complique encore leur modélisation. Grâce aux remarquables propriétés de similarité qu'ils présentent, nous pouvons, à l'aide des lasers de puissance, en reproduire une réplique homothétique et caractériser sa dynamique. Ainsi, les expériences lasers deviennent des outils essentiels et complémentaires aux observations astronomiques afin de tester, valider et améliorer notre compréhension des phénomènes astrophysiques.

E. Falize • B. Loupias • J.-P. Leidinger • C. Busschaert CEA - DAM Île-de-France A. Ravasio • M. Koenig • A. Dizière • C. D. Gregory Laboratoire pour l'utilisation des lasers intenses (LULI), École Polytechnique, Palaiseau

C. Michaut • C. Cavet Laboratoire Univers et Théorie (LUTH), CNRS, Observatoire de Paris, Meudon

a mise en service progressive d'installations lasers concentrant de plus en plus d'énergie est une opportunité unique de produire des écoulements hydro-radiatifs représentatifs de ceux que l'on rencontre dans les environnements astrophysiques de hautes énergies. Nous avons récemment montré que l'on pouvait simuler en laboratoire les processus d'accrétion qui interviennent dans un type d'objets particulier que l'on appelle les variables cataclysmiques magnétiques (VCms) [1,2].

Les VCms sont des systèmes binaires en interaction, dans lesquels une naine blanche magnétique accrête de la matière provenant d'une étoile compagnon de faible masse [3]. Le champ magnétique de certaines naines blanches est tellement puissant que le plasma accrété est directement guidé par les lignes de champ qui vont le ramener au niveau de leurs pôles magnétiques. On parle dans ce cas d'objets de type *polar* (**figure 1**). Dans ces objets, l'impact du plasma supersonique ($v \sim 1000 \text{ km/s}$) avec la photosphère de la naine blanche donne naissance à un choc fort (le choc d'accrétion) qui remonte progressivement le plasma accrété.

Lorsque la matière traverse le choc d'accrétion, elle atteint des températures de l'ordre de 10⁸ K avant de tomber sur la surface de l'objet compact. Ces conditions extrêmes sont telles que le plasma



Figure 1. (a) Vue d'artiste d'une variable cataclysmique magnétique de type polar. (b) Zoom sur la zone d'accrétion proche de la surface de la naine blanche.



Figure 2. (a) Principe de la cible laser. Le tube joue le rôle du champ magnétique et l'obstacle celui de la surface de la naine blanche. (b) Ombroscopie à deux temps différents. On voit le plasma remplir le tube. C'est lors de la collision avec l'obstacle que le choc retour se forme et remonte le plasma du tube.

émet un puissant rayonnement qui modifie les propriétés physiques de la matière accrétée [1]. Puisque la principale source de rayonnement X provient de la zone d'accrétion et que celle-ci n'est pas altérée par une source secondaire, les VCms sont des objets parfaits pour étudier les phénomènes d'accrétion dans des conditions extrêmes. Malheureusement, cette zone possède une extension spatiale faible, de l'ordre du rayon de la naine blanche ($L \sim 1000$ km), rendant difficile son observation directe et sa caractérisation. Par conséquent, toute notre compréhension repose sur des modèles astrophysiques, quelquefois contradictoires, rendant compte des observables. Dans la perspective de discriminer les différents modèles, l'expérience s'avère être une opportunité unique et fondamentale.

Grâce aux propriétés de similarité remarquables que présentent ces écoulements, nous avons montré théoriquement que l'utilisation d'une loi d'échelle adaptée permettait de reproduire et de caractériser ces chocs en laboratoire [1,4,5]. Ainsi, des phénomènes qui ne sont pas observables à l'échelle astrophysique deviennent étudiables en laboratoire. C'est l'un des rares phénomènes astrophysiques qui mêle l'hydrodynamique à des processus radiatifs dont on peut concevoir une véritable maquette. Les résultats théoriques montrent qu'il est alors nécessaire d'atteindre des vitesses $(v \sim 500 \text{ km/s})$ et des températures $(T \sim 10^6 \text{ K})$ caractéristiques de celles que l'on créera avec le Laser Mégajoule. Afin de nous préparer au mieux à l'arrivée de ce type d'installation, il est indispensable de réaliser des expériences pertinentes sur des aspects physiques spécifiques du problème étudié avec des installations plus flexibles dans le but de caractériser plus facilement le plasma de laboratoire et de valider certaines parties du dimensionnement.

C'est ce qui a été fait lors de la première expérience associée au projet POLAR et qui a été réalisée sur l'installation du LULI2000 [2].

Son objectif était de produire un choc retour dans une colonne de plasma et d'observer sa dynamique tout en caractérisant le flot de plasma incident. Pour cela, de nouveaux schémas de cibles ont été proposés et testés, et de nombreux diagnostics ont été simultanément mis en place dans le but de caractériser, dans son intégralité, la dynamique du plasma créé (**figure 2**). Au cours de cette expérience, nous avons obtenu des résultats qui ont confirmé l'apport essentiel des lasers de puissance sur la compréhension des phénomènes d'accrétion dans les VCms.

Ainsi, grâce à cette approche inédite et originale, nous avons ouvert une nouvelle voie qui s'avère très prometteuse. Ces études permettront de mieux comprendre et modéliser les processus d'accrétion intervenant dans les VCms en reproduisant de véritables modèles réduits de phénomènes astrophysiques de hautes énergies.

RÉFÉRENCES

[1] E. FALIZE et al., "Analytical structure of steady radiative shocks in magnetic cataclysmic variables", Astrophys. Spac. Sci.,

322, p. 71-75 (2009).
[2] E. FALIZE *et al.*, "The scalability of the accretion column in magnetic cataclysmic variables: the POLAR project",

Astrophys. Spac. Sci. (2011) <u>doi 10.1007/s10509-011-0655-4</u>.

[3] K. W. WU, "Accretion onto magnetic white dwarfs", *Spac. Sci. Rev.*, **93**, p. 611- 649 (2000).

[4] E. FALIZE, A. DIZIÈRE, B. LOUPIAS, "Invariance concepts and scalability of two-temperature astrophysical radiating fluids", *Astrophys. Spac. Sci.* (2011) <u>doi 10.1007/s10509-011-0677-y.</u>

[5] E. FALIZE, C. MICHAUT, S. BOUQUET, "Similarity properties and scaling laws of radiation hydrodynamic flows in laboratory astrophysics", *Astrophys. J.*, **730**(2), 96 (2011).

Sources térahertz créées par des impulsions ultrabrèves

Des impulsions laser femtosecondes opérant à des longueurs d'onde différentes sont focalisées dans un gaz pour produire un plasma excitant un rayonnement térahertz (THz) par conversion de fréquence. Des calculs analytiques démontrent l'efficacité d'une impulsion à deux couleurs pour créer un tel rayonnement. Des simulations numériques mettent en évidence les effets de propagation de l'impulsion totale dans ce processus. En accord avec des expériences directes, elles montrent aussi que la quantité de rayonnement THz augmente avec la pression du gaz.

L. Bergé CEA - DAM Île-de-France I. Babushkin Institut Weierstraß, Berlin, Allemagne W. Kuehn • K. Reimann • M. Woerner • J. Herrmann • T. Elsaesser Institut Max Born, Berlin, Allemagne C. Köhler • S. Skupin Institut Max Planck, Dresde et Université de Friedrich Schiller, Jena, Allemagne

nitialement étudié en astronomie. le domaine térahertz (THz) s'est ouvert à d'autres champs de recherche grâce aux progrès récents en photonique et en nanotechnologie. Dans le domaine de la sécurité par exemple, une analyse spectrale THz permet de distinguer des substances illégales ou des explosifs d'autres éléments semblant identiques à l'œil nu ou par photographie infrarouge [1]. Les ondes de fréquence THz ayant la propriété de se propager à travers les emballages, des éléments illicites ou pathogènes peuvent être détectés directement sans ouvrir les contenants. Le rayonnement THz est localisé dans la plage de fréquences entre 100 GHz et 30 THz. Parmi les sources THz classiques, on trouve les lasers à cascade quantique, les matériaux photoconducteurs et les générateurs exploitant des non-linéarités optiques [2].

Génération THz par des impulsions laser ultracourtes

Outre les techniques précédentes, des sources THz peuvent être générées par le couplage de deux impulsions femtosecondes de fréquences ω_0 (fondamental) et $2\omega_0$ (harmonique deux). En géométrie fortement focalisée, celles-ci produisent un plasma qui donne naissance à des impulsions dont la fréquence est une combinaison des deux premières, c'est-à-dire non seulement $2\omega_0 + \omega_0$ et $2\omega_0 \cdot \omega_0$, mais aussi une différence de fréquence $(\sim \omega_0 - \omega_0)$ proche de zéro. Cette fréquence résiduelle est à l'origine du rayonnement THz. Il a été montré que des impulsions optiques de quelques dizaines de femtosecondes en durée étaient capables de créer des champs THz d'amplitude $> 100 \, \text{kV/cm}$ [3]. Le mécanisme de génération THz restait cependant indéterminé. Ce point important a été récemment

levé [4], tout d'abord par une étude analytique du courant d'électrons créé par un champ laser bicolore :

 $E(t) = A_1 \cos(\omega_0 t) + A_2 \cos(2\omega_0 t + \theta)$ (1)

dont les composantes fondamentale et harmonique deux, d'amplitudes respectives A_1 et A_2 , ont pour



Figure 1. (a) Mécanisme schématisant la génération THz : un champ électrique laser à deux couleurs ionise le milieu et produit des électrons libres avec des modulations en forme de saut. L'ionisation prend place aux instants t_n correspondant aux maxima du champ total rendu asymétrique par la combinaison des deux couleurs. Ceci conduit à la génération d'un courant de charges J_e (b) dont la composante basse fréquence agit comme une source de rayonnement THz. L'insert de la figure (a) résume le dispositif expérimental.



Figure 2. Spectres THz (a) mesurés expérimentalement et (b) simulés numériquement pour de l'argon sous pression entre 1 mbar et 1 bar. **(c)** Spectres expérimentaux (courbes solides) et numériques (courbes brisées) pour des pressions variées (rouge: 0,4 bar, bleu: 0,2 bar, vert:0,1 bar). (d) Quantité de rayonnement THz en fonction de la pression du gaz (courbe bleue : mesure expérimentale; courbe verte: simulations numériques). L'insert détaille l'intervalle en fréquence non accessible par le dispositif expérimental (zone ombragée).

phase relative θ . Dans la limite $A_2/A_1 << 1$, les extrema du champ électrique (1) se situent aux instants discrets $\omega_0 t_n \approx n \pi - (-1)^n 2 (A_2/A_1) \sin \theta$ avec n entier. La densité de courant produite à ces instants implique une densité d'électrons libres $\rho_e(t)$ associée à des fronts d'ionisation que l'on peut assimiler à des fonctions sauts d'amplitude discrète ρ_n , de sorte que $\partial_t \rho_e = \sum_n \rho_n \delta(t - t_n)$.On montre alors que cette densité de courant, gouvernée par l'équation $\partial_t J_e = q_e^2 \rho_e(t) E(t) / m_e$, où q_e et m_e désignent la charge et la masse d'un électron, peut aussi s'écrire sous forme discrète $J_e = \sum_n J_n$ avec :

$J_n(t) \approx (q_e^2 \rho_n / m_e \omega_0) [\sin(\omega_0 t) - \sin(\omega_0 t_n)]$ (2)

La première contribution dans le terme entre crochets correspond au courant produit par l'onde de pompe. La deuxième contribution correspond à une composante basse fréquence ($\sim 1/\omega$ par transformée de Fourier) associée à la génération THz, qui n'existe que si θ et A_2 sont non nuls. La **figure 1** résume ce mécanisme en mettant en évidence la croissance en sauts de la densité électronique ainsi que les comportements asymétriques du champ laser (1) pourvu d'enveloppes gaussiennes et de sa densité de courant. Cette asymétrie, causée par la présence de l'harmonique deux, est à l'origine d'un courant basse fréquence.

Des simulations numériques exploitant le code UPPE3D (Unidirectional Pulse Propagation Equation) ont ensuite validé ce mécanisme et mis en évidence les effets de propagation de la double impulsion sur la conversion THz. En particulier, il a été démontré que les élargissements fréquentiels subis par l'impulsion fondamentale influencent directement la forme et le maximum du spectre THz [4].

Enfin, des comparaisons simulations-expériences ont démontré le rôle important de la pression du gaz sur la quantité de rayonnement THz. Le principe de l'expérience est schématisé dans l'insert de la **figure 1**. Une impulsion laser de 40 fs à 800 nm est doublée en fréquence par un cristal BBO, produisant environ 10% d'harmonique deux. L'ensemble des deux composantes (800 nm + 400 nm) est ensuite focalisé sur quelques cm dans un gaz d'argon à pression variable. Le rayonnement THz est collecté par un miroir parabolique et analysé par interférométrie Michelson. Les résultats montrent que ce rayonnement augmente presque linéairement avec la pression du milieu (**figure 2**). Les comportements expérimentaux sont en accord remarquable avec les résultats des simulations numériques.

Conclusion

Les études menées en 2010 ont permis d'expliquer le mécanisme clé de génération de sources THz à partir d'impulsions ultrabrèves combinant deux longueurs d'onde différentes. Les prochains travaux consisteront à augmenter le rayonnement basse fréquence en utilisant un nombre de composantes optiques supérieur et en exploitant des régimes de filamentation sur de longues distances.

RÉFÉRENCES

[1] M. TONOUCHI, "Cutting-edge terahertz technology", *Nat. Photonics*, 1, p. 97-105 (2007).

[2] K. REIMANN, "Table-top sources of ultrashort THz pulses", *Rep. Prog. Phys.*, **70**, p. 1597-1632 (2007).

[3] K.Y. KIM, A. J. TAYLOR, J. H. GLOWNIA, G. RODRIGUEZ, "Coherent control of terahertz supercontinuum generation in ultrafast laser-gas interactions", *Nat. Photonics*, 2, p. 605-609 (2008).

[4] I. BABUSHKIN *et al.*, "Ultrafast spatiotemporal dynamics of terahertz generation by ionizing two-color femtosecond pulses in gases", *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 053903 (2010).

Modélisation microscopique de la diffusion Raman

Dans les conditions typiques de densité et de température électroniques du Laser MégaJoule (LMJ), une estimation quantitative de la réflectivité Raman requiert un calcul précis du mouvement non linéaire de chaque électron du plasma, sous l'effet des ondes qui s'y propagent. Nous montrons ici comment tenir compte d'une telle non-linéarité, d'origine microscopique, pour décrire la propagation des ondes aussi simplement que si le plasma était un fluide, tout en estimant la réflectivité Raman aussi précisément qu'avec un code cinétique.

D. Bénisti • O. Morice • L. Gremillet CEA - DAM Île-de-France D. Strozzi Lawrence Livermore National Laboratory, USA

La réponse électronique non linéaire...

Par diffusion Raman stimulée (DRS), l'interaction d'un laser avec un plasma génère une onde électromagnétique décalée en fréquence, qui peut notamment être rétrodiffusée, et une onde plasma électronique (OPE). Cette dernière, de nature électrostatique, peut conférer aux électrons un mouvement fortement non linéaire, notamment en les piégeant dans son puits de potentiel. Cette non-linéarité, d'origine microscopique, se répercute sur la densité électronique, ρ , que nous avons réussi à calculer de manière très précise en combinant les résultats d'un développement perturbatif avec ceux d'une théorie de type adiabatique.

... aboutit à une propagation non standard de l'onde plasma...

L'expression ainsi obtenue pour ρ permet de transformer l'équation de Poisson en l'équation d'enveloppe suivante pour l'amplitude, E_p , de l'onde plasma:

 $(\partial_t + v_g \partial_x + v) E_p = \Gamma_p E_d$ (1)

dont chacun des termes du membre de gauche est une *fonctionnelle* de E_p . Dans (1), E_d est le champ de forçage laser alors que v est un taux d'amortissement non collisionnel tenant compte de l'accélération globale des électrons par l'OPE [1]. Comme le montre la **figure 1a**, v finit par s'annuler lors de la croissance de la diffusion du Raman, après que les électrons piégés aient accompli une période d'oscillation dans le potentiel de l'onde et que leur bilan d'énergie avec l'OPE devient ainsi nul.

Cela entraîne une très forte diminution de Γ_p , illustrée sur la **figure 1b**, assurant que l'onde plasma croisse de manière continue.

Plus surprenante est l'évolution de la vitesse de groupe v_g reportée sur la **figure 1c**, dont la valeur

se rapproche de celle de la vitesse de phase, v_{φ} , dans le régime non linéaire. En particulier, dans ce régime, $v_g \neq \partial \omega / \partial k$. Ce résultat, sans équivalent en optique, est une conséquence de l'extinction non linéaire de v [2].

Enfin, comme le montre la **figure 1d** en tenant compte du forçage laser, nous trouvons des solutions à la relation de dispersion non linéaire $\omega_p(k_p, E_p)$ sur une gamme de valeurs de $k_p\lambda_D$, où λ_D est la longueur de Debye, beaucoup plus large



Figure 1. Évolutions temporelles, lors de la croissance de la diffusion Raman, du taux d'amortissement non collisionnel normalisé à la fréquence plasma (a), de l'inverse de Γ_p normalisé à sa valeur linéaire (b), des vitesses de groupe (courbe bleue) et de phase (courbe en tirets noirs) de l'onde plasma normalisées à la vitesse thermique (c). Relation de dispersion non linéaire d'une onde plasma d'amplitude $e^{E_p/K_pT_e} = 0,1$ tenant compte du forçage laser (courbe rouge) et n'en tenant pas compte (courbe noire) (d).



Figure 2. Évolution temporelle de la réflectivité Raman pour un plasma de température 3 keV et dont la densité vaut 7 % de la densité vaut 7 % de la densité critique lorsque l'intensité laser vaut 2,5x10¹⁵ W/cm² ou 3x10¹⁵ W/cm² estimée à l'aide d'une simulation Vlasov [figures [a] et [c]] ou en utilisant le code d'enveloppe BRAMA [figures [b] et [d]].

que celle prévue par les théories précédentes, purement électrostatiques. Nous concluons ainsi que la diffusion Raman peut croître sur des plages de température et de densité plus importantes que celles jusque-là soupçonnées. Ce résultat important pour la fusion par confinement inertiel (FCI), ainsi que tous ceux reportés sur la **figure 1**, sont en excellent accord avec ce qu'indiquent les simulations Vlasov de la DRS **[3]**.

... qui modifie fortement la réflectivité Raman

L'altération non linéaire de la propagation de l'onde plasma, et en particulier la décroissance de son taux d'amortissement non collisionnel, peut induire de très fortes variations de la réflectivité Raman en fonction de l'intensité laser, Il. Ainsi, les résultats numériques reportés sur la figure 2 montrent qu'en augmentant I_l de 20% on peut faire croître la réflectivité Raman de plus de 3 ordres de grandeur, alors qu'une théorie linéaire n'aurait prédit une augmentation que de quelques pour cent. De plus, lors de l'une des dernières campagnes expérimentales au National Ignition Facility, la réflectivité Raman sur le cône interne a atteint une valeur proche de 40%, bien supérieure aux 0,5% prédits par les codes s'appuyant sur une théorie linéaire de la DRS [4]. On voit alors toute l'importance d'une approche non linéaire !

En couplant l'équation d'enveloppe (1) de l'onde plasma à celles des champs laser et diffusé, et les

intégrant numériquement à l'aide du code d'enveloppe BRAMA [3], nous avons pu prédire le seuil de la diffusion Raman ainsi que sa croissance au-dessus du seuil aussi précisément qu'avec un code Vlasov, tout en étant au moins 10000 fois plus rapide. C'est ce qu'illustre la **figure 2** dans le cas d'un plasma unidimensionnel et homogène.

Par ailleurs, il ne semble pas hors de portée de généraliser ces résultats à des situations plus pertinentes pour la FCI, puisque le code BRAMA résout des équations très semblables à celles actuellement utilisées dans les codes simulant la propagation d'un laser lissé dans une cavité de fusion [4]. On disposerait ainsi d'un outil très puissant permettant de prédire les configurations assurant que la diffusion Raman ne sera pas pénalisante pour le LMJ.

RÉFÉRENCES

[1] L. D. LANDAU, "On the vibrations of the electronic plasma", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **16**, p. 574-586 (1946).

[2] D. BÉNISTI et al., "Nonlinear group velocity of an electron plasma wave", *Phys. Plasmas*, **17**, 082301 (2010).

[3] D. BÉNISTI et al., "Nonlinear kinetic description of Raman growth using an envelope code and comparisons with Vlasov simulations", *Phys. Plasmas*, **17**, 102311 (2010).

[4] D. HINKEL et al., "Laser-plasma interaction analyses of National Ignition Campaign energetics experiments", Bull. Am. Soc., 54, p. 143 (2010).

Cible d'ignition et instabilités laser-plasma

La prise en compte des effets néfastes générés par l'interaction laser-plasma dès la conception des cibles d'ignition est indispensable pour assurer le succès des premières expériences de fusion sur l'installation Laser Mégajoule (LMJ). Pour la première fois, à l'aide de lois d'échelle et de simulations hydrodynamique-radiatives, des cibles d'ignition en attaque indirecte ont été conçues avec le souci constant de contraindre le design afin de limiter les instabilités laser-plasma responsables de ces effets. L'amplification de ces instabilités est directement proportionnelle à l'éclairement laser, donc aux dimensions des taches focales. Nous montrons que l'augmentation de la surface des taches focales ne permet pas de réduire proportionnellement les gains d'amplifications linéaires car l'optimisation globale de la cible impose des compromis qui modifient les conditions hydrodynamiques, celles-ci intervenant directement dans le calcul du gain.

S. Laffite • P. Loiseau CEA - DAM Île-de-France

e laser mégajoule (LMJ), en construction au Barp, près de Bordeaux, est un grand instrument de physique dédié au programme Simulation du CEA - DAM. Un des objectifs assigné à l'installation est de réussir la production d'énergie nucléaire dans une cible fusible, plusieurs fois supérieure à l'énergie investie – l'ignition – dans une géométrie d'irradiation appelée attaque indirecte. Dans ce schéma, le milieu fusible est contenu dans une bille de rayon millimétrique. Celle-ci est placée au centre d'une cavité longue d'un centimètre, dont les parois sont composées d'uranium et d'or, remplie d'un gaz composé d'hélium et d'hydrogène.

La réussite de l'ignition repose sur la maîtrise de la propagation des faisceaux laser dans le plasma chaud –c'est-à-dire des températures de l'ordre du keV– contenu dans la cavité. L'interaction des lasers avec le plasma génère des instabilités paramétriques, telles que les rétrodiffusions Raman et Brillouin stimulées, nuisant à la symétrie d'irradiation et diminuant l'énergie effectivement transmise aux parois, représentant un risque majeur d'échec.

Dans une étude publiée récemment [1], nous proposons une méthode de conception de cibles pour la fusion par confinement inertiel (FCI) en attaque indirecte sur le LMJ [2,3], avec la prise en compte des instabilités générées lors de l'interaction laser-plasma. La conception est réalisée en deux étapes. La première consiste à déterminer les pointés du laser, les lois de puissance, les dimensions de la cavité (ou *hohlraum*) et les matériaux utilisés pour la paroi et pour le gaz interne, ceci afin d'assurer une bonne symétrie d'irradiation et une compression isentropique du combustible. La seconde étape est une phase d'optimisation afin de limiter le risque lié aux instabilités laser-plasma. Elle est réalisée *a posteriori via* des estimations des gains linéaires d'amplification des rétrodiffusions



Figure 1. Schéma d'une demi-cavité de cible pour l'ignition. La paroi de la cavité, ici de forme rugby, est constituée d'un mélange U/Au, la capsule contenant le DT (solide et gazeux) est au centre.



Figure 2. Gains linéaires Brillouin (SBS) et Raman (SRS) calculés le long des parcours internes (33,2°) et externes (49°) en fonction de la surface de la tache focale définie à 3 % de l'intensité moyenne. *Les points correspondent aux simulations et les lignes aux lois d'échelle, pour un* hohlraum (*ici de forme cylindrique*).

Raman et Brillouin stimulées, ces deux phénomènes représentant le plus grand risque d'échec de l'ignition [4]. La diffusion Raman est la diffusion de l'onde laser sur les ondes plasmas électroniques, alors que la diffusion Brillouin correspond à celle sur les ondes acoustiques ioniques. Ces deux étapes sont réalisées pour chaque configuration envisagée, une configuration étant définie par la forme de la cavité, la capsule contenant le combustible et les performances laser étant figées.

La méthode que nous avons mise au point nous a permis de définir une configuration optimale avec une forme de cavité dite rugby [5] pour la capsule fusible de référence (figure 1). Les performances laser demandées, 260 TW et 0,9 MJ, permettent d'atteindre une température radiative de 300 eV dans l'enceinte contenant la cible, cette dernière dégageant 20 MJ d'énergie de fusion. L'estimation du risque lié aux instabilités laser-plasma est faite en calculant des gains d'amplifications linéaires le long du parcours des faisceaux. La configuration rugby (figure 1) se révèle particulièrement intéressante par rapport à un cylindre car elle minimise l'énergie laser nécessaire et maximise la symétrie d'irradiation pour un même risque lié aux instabilités paramétriques [5].

Nous avons aussi étudié dans quelle mesure l'augmentation de la surface des taches focales laser pouvait limiter le risque lié aux instabilités. Pour chaque surface considérée et pour chaque configuration envisagée, une étape de conception a été faite. À l'aide de bilans d'énergie et de simulations, nous avons pu déterminer des lois d'échelle permettant d'estimer le gain d'amplification en fonction de la surface de la tache focale et de l'énergie laser. Il apparaît que le bénéfice attendu, lié à la réduction du gain par diminution de l'intensité moyenne, est non linéaire. En effet, augmenter la surface des taches focales implique des trous d'entrée laser plus importants ce qui se traduit entre autres par plus de pertes d'énergie correspondant au rayonnement X sortant de la cavité. Nous en déduisons ensuite une surface limite, acceptable en terme d'énergie investie, de l'ordre de 2 mm², à partir de laquelle le gain d'amplification atteint quasiment son asymptote (figure 2).

RÉFÉRENCES

[1] S. LAFFITE, P. LOISEAU, "Design of an ignition target for the laser megajoule, mitigating parametric instabilities", *Phys. Plasmas*, **17**, 102704 (2010).

[2] J. EBRARDT, J. -M. CHAPUT, "LMJ Project status", J. Phys.: Conf. Ser., **112**, 032005 (2008).

[3] C. CHERFILS et al., "Progress on LMJ targets for ignition", Plasma Phys. Controlled Fusion, **51**, 124018 (2009).

[4] N. MEEZAN et al., "Erratum : 'National Ignition Campaign Hohlraum energetics'", *Phys. Plasmas*, **17**, 109901 (2010).

[5] M. VANDENBOOMGAERDE *et al.,* "Une cavité en forme de ballon de rugby pour le LMJ", *Chocs Avancées 2008*, p. 14-15 (2009).

Amplification paramétrique d'une impulsion à dérive de fréquence dans une fibre optique

La technique OPCPA (Optical Parametric Chirped Pulse Amplification) est un procédé d'amplification employé dans le domaine des lasers de puissance qui permet d'obtenir des impulsions ultracourtes avec un bruit optique réduit. Nous avons démontré la possibilité de remplacer les cristaux massifs, habituellement utilisés dans cette technique, par des fibres optiques. Une étape importante a été tout d'abord franchie à la longueur d'onde télécom de $1,55 \,\mu$ m avec la première démonstration expérimentale d'OPCPA dans une fibre. La technologie des fibres microstructurées a ensuite permis d'adapter cette méthode à la longueur d'onde des chaînes laser de puissance. Ce travail représente un grand pas en avant vers la réalisation de systèmes modulaires fibrés pour les pilotes de chaînes laser de puissance.

E. Hugonnot • D. Bigourd • L. Lago CEA-Cesta A. Mussot • A. Kudlinski • M. Douay IRCICA, FR CNRS 3024, Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules (PhLAM), UMR 8523 CNRS-Université Lille 1

fin d'obtenir des impulsions lasers ultracourtes de forte puissance, les laseristes utilisent un schéma d'amplification d'impulsions à dérive en fréquence. Un système étireur, basé sur la dispersion spectrale, permet d'allonger temporellement une impulsion ultracourte, réduisant ainsi sa puissance crête tout en conservant son énergie. Ceci permet ensuite de l'amplifier à des niveaux d'énergie qu'il n'aurait pas été possible d'atteindre sans étirement. Une fois amplifiée, elle est recomprimée à sa durée initiale. C'est grâce à cette méthode que des projets de laser ultrahaute intensité (UHI) comme PETAL, développé au CESTA peuvent viser des densités de puissance de l'ordre de 10^{21} W/cm². À de tels niveaux, le bruit optique présent devant l'impulsion peut devenir problématique pour les expériences d'interaction laser-matière car il risque d'ioniser la cible avant l'arrivée de l'impulsion principale. Dans le but de s'en affranchir du mieux possible, la méthode d'amplification préférée actuellement pour les lasers UHI est l'amplification paramétrique optique (OPA). Elle est basée sur un mécanisme de mélange d'ondes qui se produit dans des cristaux possédant une non-linéarité du second ordre. En respectant des conditions d'accord de phase entre les ondes, on peut notamment obtenir un transfert d'énergie entre un faisceau monochromatique de forte énergie (pompe) et le faisceau à spectre large et à dérive en fréquence que l'on cherche à amplifier (signal). Cette amplification paramétrique optique d'impulsion à dérive en fréquence (OPCPA) est très

avantageuse car, du fait de l'absence de stockage d'énergie dans le milieu, il n'y a pas de bruit généré hors du domaine temporel de superposition des impulsions pompe et signal.

Dans l'objectif d'améliorer la compacité, la stabilité et la maintenance des systèmes OPCPA actuels, nous avons récemment démontré la possibilité de remplacer les cristaux non linéaires par des fibres optiques en silice. Ce matériau ne présentant pas de manière naturelle de non-linéarité d'ordre 2, le transfert d'énergie doit donc être effectué en utilisant la non-linéarité d'ordre 3 et un mélange à 4 ondes. L'utilisation de ces amplificateurs fibrés dans le cadre de l'amplification d'impulsions à dérive de fréquence (FOPCPA) avait été théoriquement suggérée en 2006, mais en fait aucune démonstration expérimentale n'avait encore été réalisée [1]. Profitant de la disponibilité de composants télécoms standards et d'une fibre commerciale hautement non linéaire, nous avons tout d'abord réalisé une démonstration de principe à la longueur d'onde de 1,55 μ m [2]. Dans cette expérience, une impulsion longue de quelques picosecondes a été amplifiée de près de 25 décibels sans que ses caractéristiques spectrales ne soient affectées. Encouragés par ces résultats, nous avons ensuite étendu la technique dans le régime femtoseconde (1 fs = 10^{-15} s) et aux alentours de 1 μ m [3]. Cette bande spectrale est en effet la fenêtre de prédilection des chaînes laser de puissance.

Le système expérimental est présenté sur la **figure 1**. Il est composé d'une partie pompe entiè-



Figure 1. Système expérimental.

TL : laser accordable, EOM : modulateur électro-optique, YDFA : amplificateur fibré dopé Ytterbium, PC : contrôleur de polarisation, OSA : analyseur de spectre optique.

rement fibrée qui délivre des impulsions de forme temporelle carrée de largeur 10 ns et d'une partie signal délivrant des impulsions de largeur spectrale 16 nm à 1053 nm étirées à près de 10 ns par un système dispersif à réseau de diffraction. Les deux faisceaux sont synchronisés et sont envoyés dans une fibre optique microstructurée de 400 m de long dont la dispersion est soigneusement contrôlée pour respecter la condition d'accord de phase entre les différentes ondes. En jouant sur la longueur d'onde et la puissance de pompe, il est alors possible d'optimiser l'amplification. La **figure 2**



présente ainsi le spectre optique obtenu après amplification en sortie de fibre microstructurée. On peut voir le signal amplifié, le résidu de pompe et l'onde complémentaire (idler) générée pendant l'interaction. Un gain supérieur à 30 dB est obtenu sur plus de 8 nm de spectre. La phase spectrale étant conservée durant l'amplification, l'impulsion amplifiée a été recomprimée à une durée de 660 fs.

Ces résultats innovants montrent clairement que la technique OPCPA peut être étendue au domaine des fibres. À terme, ces dispositifs fibrés pourraient avantageusement intégrer des chaînes d'amplification hybrides (amplificateurs massifs et fibrés) où les premiers étages seraient complètement intégrés afin d'en simplifier l'utilisation.

RÉFÉRENCES

[1] M. HANNA *et al.*, "Fiber optical parametric chirped-pulse amplification in the femtosecond regime", *Opt. Exp.*, **14**[7], p. 2783-2790 (2006).

[2] C. CAUCHETEUR et al., "Experimental demonstration of optical parametric chirped pulse amplification in optical fiber", *Opt. Lett.*, **35**[11], p. 1786-1788 (2010).

[3] D. BIGOURD et al., "High gain optical parametric chirped pulse amplification of femtosecond pulses at 1 μ m in a microstructured optical fiber", *Opt. Lett.*, **35**(20), p. 3480-3482 (2010).

Figure 2. Spectre optique mesuré en sortie de fibre microstructurée.

Conversion de fréquence pour les chaînes laser de fortes puissances du futur

Les applications sociétales des lasers de puissance, telles que la génération d'énergie par Fusion à confinement inertiel (FCI), la transmutation de produits de fission ou la protonthérapie, nécessitent des cadences de tir bien supérieures à celle des grandes installations scientifiques comme le National Ignition Facility (NIF) ou le Laser mégajoule (LMJ). S'appuyant sur les démonstrateurs technologiques Mercury **[1]**, Halna, Polaris ou LUCIA, une nouvelle génération d'amplificateurs laser est étudiée pour les programmes européens HiPER (High Power laser Energy Research facility) ou ELI (Extreme Light Infrastructure). Les milieux laser retenus émettent dans l'infrarouge proche ($\lambda \approx 1,05 \,\mu$ m). Ce rayonnement est ensuite converti en fréquence dans des cristaux optiques non linéaires, dans le vert pour la génération d'impulsions ultracourtes, voire dans l'ultraviolet pour la FCI. L'emploi de cristaux de LBO, peu sensibles aux effets thermiques, permettrait de porter la puissance moyenne de ces chaînes jusqu'à plusieurs kW.

G. Mennerat • O. Bonville CEA-Cesta D. Lupinski Cristal Laser SA, Nancy

onctionner de manière permanente avec des cadences de tir de 10 Hz et des énergies dans la gamme kilojoule représente un défi considérable en matière de refroidissement des matériaux laser et de fiabilité d'ensemble. Certaines ruptures technologiques concernant les matériaux et les architectures sont déjà amorcées [2] pour minimiser la charge thermique et corriger les aberrations associées. De nouveaux compromis technico-économiques devront être trouvés autour de tailles de faisceaux de 10 à 15 cm. *In fine*, les cristaux convertisseurs devront fonctionner à des puissances moyennes dans la gamme 10 kW, soit deux ordres de grandeur supérieurs aux niveaux démontrés aujourd'hui.

Les monocristaux de dihydrogéno-phosphate de potassium purs (KH_2PO_4 ou KDP) ou deutérés (DKDP) sont les seuls cristaux non linéaires qui puissent être produits industriellement en dimensions (40 x 40 cm²) et quantités suffisantes pour équiper les centaines de faisceaux du NIF et du LMJ. Il existe un besoin de cristaux de dimensions intermédiaires plus tolérants que (D)KDP vis-à-vis des imperfections du faisceau incident et combinant des propriétés optiques et thermiques compatibles avec la très forte puissance moyenne. En outre, leur intensité de fonctionnement devra être substantiellement plus faible pour atténuer les risques d'endommagement laser, exacerbés à haute cadence.

Doublement de fréquence

Des lasers ultra-intenses de la classe multipétawatt, fondés sur la technique d'amplification à dérive de fréquence, sont en cours de construction de par le monde. Pour atteindre des durées d'impulsions inférieures à 100 femtosecondes (soit 10⁻¹³ s), on emploie de gros amplificateurs large bande soit par effet laser dans des cristaux de saphir dopé au titane (TiSa), soit par effet optique paramétrique (OPA) dans des cristaux non linéaires. Ces deux variantes sont pompées par des impulsions énergétiques courtes (sub-ns à 30 ns) dans le vert (longueur d'onde de 500 à 550 nm).

Le pompage de cristaux TiSa s'accommodant bien d'une qualité de faisceau moyenne, les spécifications de front d'onde de ces lasers de pompe sont principalement déterminées par la criticité angulaire du doublement de fréquence. Relâcher ce paramètre simplifie l'architecture globale ; une meilleure conversion impacte en outre les coûts d'acquisition et de fonctionnement.



Figure 1. Échantillons de LBO, de 1 kg.

La PME nancéenne Cristal Laser a mis au point un procédé industriel de croissance cristalline fournissant des composants de triborate de lithium (LiB₃O₅ ou LBO) d'excellente homogénéité [3] (figure 1). Une étude de faisabilité, financée par le projet ELI, a démontré la production de 217 J de rayonnement à 527 nm par doublement de fréquence du faisceau principal d'Alisé, avec un rendement record de 92% dans des cristaux de 65 mm de diamètre [4]. La simple substitution de DKDP par LBO nous a par ailleurs permis, grâce à sa tolérance angulaire 10 fois plus large, de porter de 30% à 60% le rendement de conversion de faisceaux fortement aberrants, issus de lasers commerciaux délivrant des impulsions de 40 J à la cadence de 0,1 Hz [5].

Le LBO présente une résistance à l'endommagement laser exceptionnelle (> 60 J/cm^2) et une non-linéarité deux fois supérieure à celle du DKDP. Sa très faible absorption et sa bonne conductivité lui confèrent un facteur de mérite thermique plus de 15 fois supérieur. Ces caractéristiques ont permis de produire 700 W de vert dans un système laser de marquage industriel [6] et laissent présager un excellent comportement à forte énergie et haute cadence.

Triplement de fréquence

Les applications en physique des hautes énergies nécessitent la production d'ultraviolet par triplement de fréquence. Le LBO dispose, pour cela, des mêmes avantages relatifs que pour le doublement de fréquence. Son potentiel a été validé dans l'installation Alisé en utilisant des cristaux de 65 mm de diamètre. 360 J de rayonnement à 351 nm ont été produits en régime monocoup à partir de 450 J de rayonnement fondamental infrarouge, avec un rendement énergétique global exceptionnel de 80% [7].

Les progrès en cristallogenèse se poursuivent; la production industrielle de composants de LBO décimétriques compatibles avec la gamme kilojoule est atteignable avec les techniques actuelles d'ici quelques années. Le LBO est par ailleurs un candidat prometteur pour l'amplification paramétrique optique d'impulsions ultra-courtes (< 20 fs) ultra-intense (plusieurs dizaines de pétawatts).

RÉFÉRENCES

[1] A. BAYRAMIAN *et al.*, "High-average-power femto-petawatt laser pumped by the Mercury laser facility", *J. Opt. Soc. Am. B*, 25, B57-B61 (2008).

[2] B. LE GARREC, "Technologies Lasers Futures", *Chocs Avancées*, p. 7-9 (2007).

[3] A. KOKH et al., "Growth of high quality - large size LBO crystals for high energy second harmonic generation", *J. Crystal Growth*, **312**, p. 1774-1778 (2010).

[4] G. MENNERAT *et al.*, "Very High Efficiency High-Energy Frequency Doubling in the Alisé Facility", in Advanced Solid State Photonics, OSA (2010).

[5] G. MENNERAT et al., "Second harmonic generation of strongly aberrated beams in DKDP and LBO", Proc. Advanced-Solid-State Photonics Conference, Denver (CO) (2009).

[6] C. STOLZENBURG et al, "700 W intracavity-frequency doubled Yb: YAG thin-disk laser at 100 kHz repetition rate", in Solid State Lasers XIX: Technology and Devices, SPIE proceedings 7578 (2010).

[7] G. MENNERAT *et al.*, "Frequency tripling for next generation high-energy lasers", Proc. Advanced-Solid-State Photonics Conference, Istanbul (Turquie), (2011).

Endommagement laser multi-longueur d'onde des cristaux de KDP

Sur la base de résultats expérimentaux obtenus en conditions représentatives de l'endommagement laser des cristaux de KDP en régime de conversion de fréquence, nous avons développé un modèle d'endommagement. Ce dernier, qui inclut la présence simultanée de deux impulsions laser de longueur d'onde différente, se fonde sur le transfert de chaleur, la théorie de Mie et un modèle de Drude. La comparaison des résultats expérimentaux et théoriques permet de mieux comprendre les mécanismes physiques mis en jeu. En particulier, on montre qu'un processus d'absorption de 3 photons à 3ω initie l'endommagement laser.

S. Reyné • L. Lamaignère CEA-Cesta G. Duchateau CEA-Le Ripault J.-Y. Natoli Institut Fresnel, Marseille

fin de produire des impulsions laser Nd : verre nanoseconde à 3ω (λ = 351 nm), des cristaux non linéaires de DKDP (KD₂PO₄) sont utilisés en fin de chaîne du LMJ pour sommer l'harmonique fondamental 1ω ($\lambda = 1054$ nm) et le second harmonique 2ω ($\lambda = 532$ nm). Cependant, il a été montré expérimentalement que ces cristaux s'endommagent dans les conditions opérationnelles de conversion de fréquence avec une fluence dont l'ordre de grandeur est $F \approx 10 \text{ J/cm}^2$. Afin d'augmenter la tenue au flux des cristaux dans ce régime, il est donc nécessaire de comprendre les mécanismes physiques d'Endommagement laser (EL) lorsque plusieurs impulsions de longueurs d'onde différentes sont présentes. Pour cela, nous avons mesuré l'évolution de la densité de dommages en fonction des fluences 3ω ($F_{3\omega}$) et 1ω ($F_{1\omega}$) sur un banc laser de laboratoire. L'adaptation d'un modèle d'endommagement mono-longueur d'onde [1] au cas qui nous intéresse nous a alors permis d'interpréter les données expérimentales et d'en déduire des informations sur le scénario de l'EL dans les cristaux de KDP [2].

L'étude expérimentale a été menée avec le laser BLANCO du CEA-Cesta [3]. Il délivre des impulsions d'environ 6 ns avec une largeur de faisceau gaussien à mi-hauteur (1/e) de 450 µm et 700 µm respectivement pour le 3ω et le 1ω . Les tests ont été effectués avec des faisceaux parallèles sur toute l'épaisseur du cristal et une procédure 1/1 [2] pour générer les sites endommagés. Ces derniers sont détectés en utilisant un laser hélium-néon. Sur cette base, la **figure 1** représente l'évolution de la densité de dommages ρ en fonction des fluences 3ω et 1ω . Un motif particulier apparaît : pour les plus grandes densités (> 3 dom./mm³), les courbes iso-densité sont des droites. On peut ainsi écrire $F_{(3\omega,1\omega)} = sF_{1\omega} + F_{3\omega}$ où $F_{(3\omega,1\omega)}$ représente la fluence 3ω induisant une certaine densité de dommages lorsqu'une impulsion 1ω est présente. On voit ainsi qu'il existe un couplage entre les deux longueurs d'onde qui est notamment confirmé par le fait que $\rho(F_{3\omega}F_{1\omega}) > \rho(F_{3\omega}) + \rho(F_{1\omega})$ où $\rho(F_{3\omega})$ et $\rho(F_{1\omega})$ sont les densités de dommages mono-longueur



Figure 1. Évolution de la densité de dommages en fonction des fluences 3ω et 1ω . Les résultats expérimentaux et du modèle (avec $\delta = 3$) sont représentés avec l'échelle de couleurs et les traits pointillés blancs respectivement.



d'onde. Ainsi, il apparaît que la pente *s* rend compte du couplage et, pour les plus grandes densités, sa valeur est s \approx -0,29.

Afin d'interpréter ces comportements, nous avons développé un modèle adapté au cas à deux longueurs d'onde. Ce modèle repose sur l'approche DMT (Drude-Mie-Thermique) [2]. En substance, ce modèle permet de prédire l'élévation de température d'une distribution (en taille) de défauts précurseurs nanométriques qui se transforment rapidement en boules de plasma. Leur absorption Q_{abs} est obtenue avec la théorie de Mie où les indices optiques, qui dépendent de la densité d'électrons de conduction, sont évalués avec un modèle de Drude. La résolution de l'équation de Fourier en géométrie sphérique permet d'obtenir la température T des boules de plasmas à la fin de l'impulsion laser. Lorsque T est supérieure à une température critique (≈ 10000 K [4]), on suppose qu'il y a EL. En outre, on peut montrer que $T \propto Q_{abs}^{(\omega)} F_{\omega}$. Dans le cas à deux longueurs d'onde, on a :

$$T \propto Q_{abs}^{(3\omega)}(3\omega, 1\omega) F_{3\omega} + Q_{abs}^{(1\omega)}(3\omega, 1\omega) F_{1\omega}$$

où les coefficients d'absorption, proportionnels à la densité électronique n_e en régime de Rayleigh, dépendent des deux longueurs d'onde dans le cas général car chacune d'elle participe à la production du plasma par absorption multiphotonique. Dans notre cas, on suppose que c'est l'harmonique 3ω qui produit essentiellement les électrons de bande de conduction (BC) car le nombre de photons nécessaires pour la transition $BV \rightarrow BC$ (BV = bande de valence) est significativement plus faible qu'à 1ω et le processus multiphotonique est non linéaire. On peut alors montre [2] que :

$$\begin{split} &Q_{abs}^{(3\omega)}(3\omega,1\omega)\approx Q_{abs}^{(3\omega)}(3\omega)\\ \text{et}\\ &Q_{abs}^{(1\omega)}(3\omega,1\omega)\approx\beta F_{3\omega}^{\delta}\,Q_{abs}^{(1\omega)} \end{split}$$

Figure 2. Évolution de la pente théorique s en fonction de l'ordre multiphotonique δ .

où β et δ sont respectivement une constante et l'ordre multiphotonique associé à l'énergie de photon $3\hbar\omega$. À partir de ce modèle, on est alors capable de prédire l'évolution de la densité de dommages en fonction des fluences $F_{3\omega}$ et $F_{1\omega}$, et en particulier de prédire la valeur de la pente *s*.

La figure 2 montre l'évolution de la pente s en fonction de l'ordre multiphotonique δ . Le meilleur accord avec les données expérimentales (s = -0.29) est obtenu pour δ = 3. Les prédictions en densité de dommages associées à cette valeur de δ sont reportées sur la **figure 1** où l'on voit que l'accord avec le résultat expérimental est bon pour les grandes densités de dommages (courbe en pointillés blancs). La différence qui apparaît aux faibles densités peut s'expliquer par certaines approximations du modèle [2]. Ainsi, ces résultats montrent que la production du plasma, i.e. l'initiation d'un EL, est due à un mécanisme d'absorption de 3 photons d'énergie 3,54 eV (3ω) . Ce mécanisme est cohérent avec la valeur du gap E_g de KDP qui est de l'ordre de 8 eV [5]. En effet, l'absorption de 3 photons est nécessaire pour amener aux électrons une énergie supérieure à E_g afin d'assurer leur (modérées) mises en jeu, on notera que des états intermédiaires dans le gap [5] sont nécessaires afin d'atteindre une densité d'électrons en BC suffisante pour chauffer jusqu'à une température de l'ordre de 10000 K. On en déduit ainsi que l'influence des défauts précurseurs sur la structure électronique de KDP est d'introduire des états supplémentaires dans le gap.

RÉFÉRENCES

[1] A. DYAN, F. ENGUEHARD, S. LALLICH, H. PIOMBINI, G. DUCHATEAU, "Scaling laws in laser-induced potassium dihydrogen phosphate crystal damage by nanosecond pulses at 3 omega", *J. Opt. Soc. Am.*, **25**(6), p. 1087-1095 (2008).

[2] S. REYNÉ, G. DUCHATEAU, J.-Y. NATOLI, L. LAMAIGNÈRE, "Pump-pump experiment in KH_2PO_4 crystals: Coupling two different wavelengths to identify the laser-induced damage mechanisms in the nanosecond regime", *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 121102 (2010).

[3] L. LAMAIGNERE, T. DONVAL, M. LOISEAU, J.C. PONCETTA, G. RAZE, C. MESLIN, B. BERTUSSI, H. BERCEGOL, "Accurate measurements of laser-induced bulk damage density", *Meas. Sci. Technol.*, 20(9), 095701 (2009).

[4] C.W. CARR *et al*, "Localized dynamics during laser-induced damage in optical materials", *Phys. Rev. Lett.*, **92**(8), 087401 (2004).

[5] C.W. CARR, H.B. RADOUSKY, S.G. DEMOS, "Wavelength dependence of laser-induced damage: Determining the damage initiation mechanisms", *Phys. Rev. Lett.*, **91**(12), 127402 (2003).

Modélisation thermo-statistique des plasmas corrélés

Ce travail concerne le calcul quantique de la structure atomique au-delà du modèle de l'ion moyen. Notre approche inclut les fluctuations dues aux configurations électroniques décrivant différents états d'ionisation et d'excitation. Nous disposons maintenant d'un modèle de plasma capable de produire des équations d'état, coefficients de transport et opacités à l'Équilibre thermodynamique local (ETL). Nous présentons son application au calcul de la résistivité électrique statique dans la formulation de Ziman-Evans.

J.-C Pain • G. Dejonghe CEA - DAM Île-de-France

a description des plasmas fortement couplés (interaction coulombienne > agitation thermique) et partiellement dégénérés (température de l'ordre de l'énergie de Fermi) est difficile. Pour de tels milieux, typiques des intérieurs planétaires (Jupiter, Saturne) et de la phase de compression en fusion inertielle, la densité est proche de celle du solide et la température peut atteindre quelques dizaines d'eV (matière dense et tiède). La dynamique moléculaire quantique est une technique décrivant l'effet des ions et des électrons dans le cadre de la Théorie de la fonctionnelle densité (TFD) qui s'avère performante à basse température autour de la densité du solide ρ_0 [1]. Son coût numérique devient prohibitif lorsque des électrons de cœur se délocalisent, par augmentation de la température ou si la densité s'écarte de ρ_0 . Notre approche repose sur une détermination ab initio de la structure électronique fondée sur la TFD par un calcul auto-cohérent «tous électrons» en champ central (symétrie sphérique). La méthode des super-configurations (groupes de configurations proches en énergie) nous permet d'aborder l'effet des fluctuations de populations des orbitales et la délocalisation des électrons, et de ce fait permet d'aller plus loin que les modèles d'atomes moyens conventionnels [2].

Théorie de la fonctionnelle densité, états d'ionisation et d'excitation du plasma

Dans les calculs quantiques usuels, les fonctions d'onde sont évaluées dans le potentiel auto-cohérent d'un atome fictif, d'ionisation Z^* (ion moyen). En réalité, un plasma d'ions multichargés contient un nombre considérable de configurations. Une solution consiste à les rassembler en Super-configurations (SC). Le potentiel électrostatique est calculé de manière auto-cohérente pour chaque SC dans le cadre de la TFD et nous avons amélioré (grâce à l'approche variationnelle de Jensen-Feynman consistant à approcher la solution exacte par une forme plus simple dont les paramètres sont obtenus par minimisation) la prise en compte des interactions coulombiennes, point-clé de la théorie [3]. Les fonctions d'onde électroniques sont obtenues par résolution de l'équation de Schrödinger avec corrections relativistes (Pauli). Cette approche quantique procède à la détection des résonances (pics dans les densités d'état et les sections efficaces de transfert d'impulsion), accompagnant la disparition d'un état lié dans le continuum. La grandeur recherchée *A* (pression, énergie interne, résistivité...) du plasma s'écrit comme la moyenne sur les SC:

$$A \propto \sum_{\Xi} \exp\left[-\frac{G_{\Xi}}{k_B T_{\Xi}}\right] A_{\Xi} \quad (1)$$

où G_{Ξ} , T_{Ξ} sont l'enthalpie libre et la température (effets hors ETL) de la SC Ξ .



Figure 1. Section efficace de diffusion (unités atomiques) pour Al à ρ = 2,7 g/cm3 et différentes températures.



Équation d'état et résistivité

Les physiciens des plasmas connaissent bien la formule de Spitzer donnant la résistivité d'un plasma non dégénéré (à faible densité et haute température). Elle implique le logarithme coulombien $\ln \Lambda$ dont l'estimation est délicate. La formulation de Ziman du temps de collision électron-ion, étendue aux liquides et aux plasmas, découle de l'équation de Boltzmann et permet d'écrire la résistivité comme :

$$\eta = -\frac{\hbar}{3\pi e^2} \frac{1}{n_i Z^{*2}} \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{df}{d\varepsilon} \int_0^{2k} q^3 \sigma(q,k) S(q) dq ;$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad ; \quad q^2 = 2k^2 (1 - \cos(\theta)) \quad (\mathbf{2})$$

où q est l'impulsion de l'électron diffusé dans la direction θ , $\sigma(q,k)$ la section efficace de collision élastique électron-ion, S(q) le facteur de structure ionique, $f(\varepsilon)$ la distribution de Fermi-Dirac et n_i la densité de matière. Les diffusions multiples sont négligées. $\sigma(q,k)$ requiert les fonctions d'onde (déphasages) du continuum (les **figures 1 et 2** représentent $\sigma(q,k)$ respectivement pour différentes températures et différentes SC). Nous avons



Figure 3. Comparaisons de valeurs de résistivité avec l'expérience de J. Benage et deux modèles théoriques.

Figure 2. Sections efficaces de diffusion de trois SC pour Al à $\rho = 2,7$ g/cm³ et T = 25 eV.

étudié l'influence des conditions aux limites des fonctions d'onde, ainsi que du facteur de structure ionique. Nos calculs, incluant les contributions de toutes les configurations à la résistivité (**figure 3**), sont comparés avec les mesures de Benage *et al.* [4]. La température, non mesurée au cours de l'expérience (technique du fil explosé), est estimée à partir de tables d'équations d'état pour restituer le bilan d'énergie. Les écarts entre nos valeurs et les modèles existants (**figure 3**) sont du même ordre de grandeur que l'incertitude expérimentale.

Nous envisageons d'inclure l'effet des corrélations ioniques ainsi que les diffusions multiples, et d'étudier l'effet Ramsauer-Townsend (existence d'un minimum dans la section efficace de diffusion des électrons par les atomes dans les gaz rares). Ce travail constitue un premier pas vers l'extension de la théorie de Ziman-Evans aux plasmas de mélange. La description statistique des configurations, conjuguée à une bonne modélisation de l'écrantage, permet également de calculer des quantités optiques, comme l'opacité [7] ou l'émissivité [8], lorsque le nombre de transitions devient trop important.

RÉFÉRENCES

[1] V. RECOULES et al., "Electrical conductivity of hot expanded aluminium: experimental results and ab initio calculations", *Phys. Rev. E*, **66**, 056412 (2002).

[2] J.-C. PAIN, G. DEJONGHE, "Electrical resistivity in warm dense plasmas beyond the average-atom model", *Contrib. Plasma Phys.*, **50**, p. 39-45 (2010).

[3] J.-C. PAIN, F. GILLERON, G. FAUSSURIER, "Jensen-Feynman approach to the statistics of interacting electrons", *Phys. Rev. E*, **80**, 026703 (2009).

[4] J. BENAGE, "Review of electrical resistivity measurements of dense aluminum and comparison to theory", *Phys. Plasmas*, 7, p. 2040-2045 (2000).

[5] Y.T. LEE, R.M. MORE, "An electron conductivity model for dense plasmas", *Phys. Fluids*, **27**, p. 1273-1286 (1984).

[6] C. BLANCARD, G. FAUSSURIER, "Equation of state and transport coefficients for dense plasmas", *Phys. Rev. E*, 69, 016409 (2004).

[7] S. TURCK-CHIEZE et al., "Radiative properties of stellar plasmas and open challenges", *Astrophy. Space Sci.*, <u>DOI 10.1007/s10509-010-0583-8</u> (2011).

[8] D. BENREDJEM, A. CALISTI, J.-C. PAIN, F. GILLERON, "Radiative power losses in fusion plasmas", *Can. J. Phys.*, sous presse (2011).

Courbe de fusion du tantale: la fin d'une controverse

La courbe de fusion est la ligne de transition, T(P), entre le solide et le liquide dans le plan température(T)/pression(P). C'est une donnée essentielle pour décrire les lois de comportement d'un matériau. C'est en particulier une ligne de rupture dans sa réponse mécanique. Mais les résultats de mesure ou de calcul de la fusion sous pression sont encore très discutés dans la littérature. En particulier, les points de fusion du tantale mesurés par compression statique et dynamique étaient en net désaccord. Nous avons revisité la courbe de fusion de ce métal en compression statique, en utilisant la cellule à enclumes de diamants chauffée par laser et un nouveau diagnostic de la fusion basé sur la diffraction de rayons X synchrotron. Des difficultés expérimentales ont été identifiées, qui avaient pu biaiser les résultats publiés. Nos points de fusion sont en accord avec les mesures dynamiques, ce qui met fin à la controverse concernant la fusion de cet élément sous pression.

A. Dewaele • P. Loubeyre CEA - DAM Île-de-France M. Mezouar European Synchrotron Radiation Facility (ESRF), Grenoble N. Guignot Synchrotron Soleil, Saint Aubin

es dernières années, de nombreux travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés à la courbe de fusion des éléments sous haute pression. Cependant, la fusion reste une transition de phase difficile à prédire et modéliser, car elle a lieu à haute température, quand le système est éloigné de son état fondamental (à T = 0 K) qui est celui qui est prédit exactement par les calculs *ab initio*. Sa caractérisation expérimentale est également difficile car il s'agit de créer et de mesurer des conditions extrêmes de pression (plusieurs millions d'atmosphères) et de température (plusieurs milliers de K) et dans le même temps d'atteindre et de caractériser l'état d'équilibre du système.

Le cas du tantale est exemplaire des efforts, des problèmes et des controverses dans la détermination de la courbe de fusion des éléments [1]. Encore récemment, les températures de fusion mesurées pour le tantale différaient de plusieurs milliers de degrés dans le domaine 100-300 GPa (1-3 millions d'atmosphères). En utilisant la compression par un choc créé par l'impact d'un projectile sur l'échantillon, un point de fusion à environ 9700 K à 300 GPa [1] avait été obtenu. Mais en utilisant des Cellules à enclumes de diamants chauffées par laser (CEDL), où l'échantillon est comprimé entre deux diamants et chauffé par un laser infrarouge focalisé, une équipe allemande a mesuré visuellement des points de fusion atteignant seulement 3 730 K à 100 GPa [2]. Cette courbe de fusion était en désaccord avec les prédictions théoriques annonçant une pente dT/dP environ quatre fois plus importante ; extrapolée à plus haute pression, elle était également incompatible avec les points de fusion mesurés par choc. Il a été proposé que le changement observé

Figure 1. Schéma de la chambre de pression dans la cellule à enclumes de diamants chauffée par laser.

Différents milieux transmetteurs de pression (sels, gaz rares, oxydes) ont été utilisés.





en CEDL ne correspondait pas à la fusion mais au polymorphisme [3] ou à un changement des propriétés mécaniques [4].

Nous avons utilisé un nouveau diagnostic de fusion, basé sur la diffraction de rayons X en CEDL, pour étudier la fusion du tantale. Ce diagnostic avait été validé pour le plomb [5]. Le faisceau de rayons X synchrotron et les lasers sont focalisés sur un même point de l'échantillon; sa température est mesurée par pyrométrie (figure 1). La diffraction de rayons X permet de détecter la fusion, le polymorphisme, ainsi que des réactions chimiques de l'échantillon avec son environnement au cours du chauffage. La mesure de la dilatation thermique de l'échantillon par diffraction de rayons X permet de confirmer la mesure pyrométrique de sa température.

Nos expériences ont montré que le tantale réagit avec l'enclume en diamant de la CEDL pour former un carbure. Cette réaction chimique perturbe fortement l'observation de changements structuraux dans l'échantillon lors du chauffage. Nous avons aussi observé que la fusion du matériau entourant le tantale, appelé milieu transmetteur de pression (comme l'argon ou le NaCl) peut changer ses propriétés optiques et donc affecter les mesures pyrométriques. Ceci est un réel problème pour le tantale qui est très réfractaire, et pour qui il est impossible de trouver un milieu transmetteur de pression qui ne fonde pas avant lui. Ces difficultés peuvent expliquer les points de fusion anormalement bas mesurés en CEDL [2]. Les mesures pyrométriques validées par la dilatation thermique de l'échantillon montrent que la température de fusion du tantale est bien plus élevée que ce qui avait été mesuré précédemment en CEDL:5500 \pm 500 K à 125 GPa. Jusqu'à ce point, le tantale ne subit aucune transformation polymorphique.

La **figure 2** montre que dorénavant, les points de fusion en CEDL sont en accord avec les points par choc et les prédictions théoriques [1]. Nous pensons que cette étude établit de nouveaux standards pour les études de physiques en CEDL, qui doivent être appliquées en particulier pour étudier le diagramme de phase du fer sous très haute pression.

RÉFÉRENCES

[1] A. DEWAELE, M. MEZOUAR, N. GUIGNOT, P. LOUBEYRE, "High Melting Points of Tantalum in a Laser-Heated Diamond Anvil Cell", *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 255701 (2010).

[2] D. ERRANDONEA, B. SCHWAGER, R. DITZ, C. GESSMANN, R. BOEHLER, M. ROSS, "Systematics of transition-metal melting", *Phys. Rev. B*, **63**, 132104 (2001).

[3] L. BURAKOVSKY *et al.*, "High-Pressure - High-Temperature Polymorphism in Ta: Resolving an Ongoing Experimental Controversy", *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 255702 (2010).

[4] C. J. WU, P. SÖDERLIND, J. N. GLOSLI, J. E. KLEPEIS, "Shear-induced anisotropic plastic flow from body-centred-cubic tantalum before melting", *Nature Mater.*, **8**, p. 223-228 (2009).

[5] A. DEWAELE, M. MEZOUAR, N. GUIGNOT, P. LOUBEYRE, "Melting of lead under high pressure studied using second-scale time-resolved x-ray diffraction", *Phys. Rev. B*, **76**, 144106 (2007).

Équation d'état de l'hydrogène du solide moléculaire au plasma très dense

L'équation d'état est la relation macroscopique entre l'énergie, la température, la densité et la pression. Elle reflète les changements microscopiques structuraux, électroniques et quantiques de la matière. Dans le cas de l'hydrogène, il a été récemment montré que les modèles d'équation d'état couramment utilisés conduisaient à des différences majeures dans les applications, comme l'existence d'un cœur massique ou non au centre de Jupiter, ou bien une réduction de 30 % sur le gain d'une cible de fusion par confinement inertiel. La connaissance de l'équation d'état avec une précision à mieux que 4 % sur la densité semble donc nécessaire pour garantir la fiabilité de telles prédictions. Nous avons construit une équation d'état de l'hydrogène basée sur une grille de calculs *ab initio*, du solide moléculaire au plasma très dense. Nous montrons qu'une précision de 4 % est atteinte sur tout le domaine thermodynamique.

L. Caillabet • S. Mazevet • P. Loubeyre CEA - DAM Île-de-France

e comportement de l'hydrogène sous très hautes pressions continue de faire l'objet de nombreux travaux. Les motivations de ces efforts sont multiples et sont illustrées sur la figure 1. D'une part, l'hydrogène est le système modèle pour comprendre les effets quantiques de la densité. Un sujet phare en est la recherche de l'hydrogène métallique et une discussion actuelle est de savoir si une métallisation conduisant à une transition du premier ordre, la «Plasma phase transition», existe ou non dans la phase fluide. D'autre part, les propriétés de l'hydrogène très dense sont importantes pour comprendre de nombreux objets et phénomènes astrophysiques, comme la formation et la structure interne des planètes géantes. Enfin, la maîtrise de la fusion par confinement inertiel demande de bien comprendre les chemins de compression d'une bille de deutérium-tritium (DT), du solide cryogénique jusqu'au plasma très dense et très chaud.

Jusqu'à présent, les différentes équations d'état (EE) de l'hydrogène étaient basées sur des modèles physiques supposés décrire correctement l'état microscopique des différentes phases, avec suffisamment de paramètres indépendants pour ajuster l'équation d'état sur les résultats expérimentaux existants. La précision de celle-ci n'est alors pas garantie hors du domaine de l'ajustement. Or, dans le cas de l'hydrogène, on ne dispose que de deux mesures. En phase solide, la courbe de compression a été mesurée avec précision jusqu'à 120 GPa à 300K par diffraction X en compression statique. Dans le fluide dense, la courbe d'Hugoniot principale a été mesurée jusqu'à 200 GPa par de nombreuses techniques, donnant au départ une large dispersion des résultats mais qui, après 10 ans de controverse, semblent maintenant converger **[1-3]**.

Une autre approche théorique était mûre pour une détermination complète de l'équation d'état de l'hydrogène. Au cours de ces dix dernières années, la théorie de la fonctionnelle de la densité a été appliquée pour le calcul de l'équation d'état de nombreux systèmes, comme les métaux. La rapide augmentation de la puissance de calcul a permis de tester les différentes approximations de cette approche en termes de convergence, de nombre d'atomes ou de fonctionnelles d'échange et de corrélation. Il est maintenant bien admis que cette approche permet de calculer avec une bonne précision l'équation d'état d'un système avec comme seul paramètre d'entrée le numéro atomique. Le point important est que la validation expérimentale du calcul dans un domaine limité de l'espace des phases permet d'en retirer un degré de confiance sur une zone très élargie de l'espace des phases, généralement hors de portée de la mesure. En effet, le calcul permet de résoudre de manière







homogène l'Hamiltonien du système dans tout l'espace des phases. Plusieurs groupes ont déjà utilisé ces méthodes **[4,5]** dites *ab initio*, pour calculer des points d'équation d'état de l'hydrogène, en particulier dans le domaine très controversé expérimentalement du fluide dense se dissociant le long de la courbe d'Hugoniot principale. Mais il n'existait avant notre travail aucune équation d'état multi-phases de l'hydrogène basée sur les seuls calculs *ab initio*.

Nous avons construit une équation d'état multi-phases de l'hydrogène, thermodynamiquement consistante et ajustée sur une grille complète de données de calculs *ab initio* [6]. Cela a été effectué en trois étapes. Dans un premier temps, nous avons constitué un jeu de données ab initio, à l'aide du code ABINIT, permettant de couvrir le domaine du diagramme de phase indiqué en jaune sur la figure 1. Dans ce domaine, les électrons sont fortement dégénérés et corrélés et les effets «many-body» difficiles à calculer par des modèles physiques. Dans cette même région, les effets quantiques des noyaux ne peuvent être négligés. À la limite de ce domaine, nos calculs retrouvent les descriptions de modèles bien établis dans la région en bleu. Dans un second temps, nous avons utilisé des modèles physiques pour ajuster ce jeu de données ab initio. Pour le solide, nous avons utilisé un modèle à deux températures de Debye et un modèle de Vinet pour la courbe froide. Cette description donne les effets quantiques des noyaux. Pour la phase fluide, les données ont été ajustées par la forme d'énergie du plasma à une composante et avec une loi d'action de masse pour la dissociation moléculaire. La fraction de dissociation est le paramètre ajusté, ce qui permet d'obtenir de manière implicite l'énergie moléculaire. L'énergie de point zéro des noyaux est prise en compte par le terme correctif en \hbar^2 de l'énergie libre. Cette paramétrisation de l'énergie permet de remonter, par intégration à l'énergie libre, à une constante

Figure 2. Comparaison entre les prédictions de l'équation d'état et les données expérimentales. (a) Vitesse du son dans le fluide H_2 . (b) Hugoniot principale de D_2 . (c) Courbe de fusion. (d) Équation d'état du solide H_2 à 300 K.

additive près. Enfin, dans une troisième étape, l'équation d'état est confrontée à toutes les données expérimentales publiées à l'heure actuelle.

La comparaison avec quatre types de mesures dans l'hydrogène dense est illustrée sur la figure 2. Le calcul de la vitesse du son adiabatique du fluide moléculaire H₂ est en excellent accord avec la mesure [7]. Le calcul de la courbe d'Hugoniot principale passe à travers la dispersion des points expérimentaux les plus récents [2,3]. La courbe de compression du solide à 300 K est en bon accord avec la mesure : une petite différence est ici visible du fait des très faibles barres d'erreur de la mesure [8]. Enfin, la courbe de fusion calculée est en très bon accord avec la mesure [9]. De plus, la prise en compte des effets quantiques permet de prédire un déplacement significatif à haute pression. Cette équation d'état présente une avancée significative en termes de précision, d'étendue du domaine de confiance, de cohérence thermodynamique et de simplicité dans la formulation. L'accord avec toutes les données expérimentales accessibles est excellent. Cela valide les approximations des calculs dans un domaine où la description théorique est la plus difficile. On peut en déduire que l'équation d'état de l'hydrogène est maintenant décrite avec une précision d'au moins 4% en densité. L'application de cette équation d'état devrait être très utile pour modéliser des compressions dynamiques de l'hydrogène.

RÉFÉRENCES

[1] G. COLLINS et al., "Measurements of the equation of state of Deuterium at the fluid insulator-metal transition", *Science*, **281**, p. 1178-1181 (1998).

[2] M. D. KNUDSON et al., "Principal Hugoniot, reverberating wave, and mechanical reshock measurements of liquid deuterium to 400 GPa using plate impact techniques", *Phys. Rev. B*, 69(14), 144209 (2004).

[3] M. D. KNUDSON, M. P. DESJARLAIS, "Shock Compression of Quartz to 1.6 TPa: Redefining a Pressure Standard", *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 225501 (2009).

[4] T.J. LENOSKY *et al.*, "Density-functional calculation of the Hugoniot of shocked liquid deuterium", *Phys. Rev.*, B, **61**(1), p. 1-4 (2000).

 M. P. DESJARLAIS, "Density-functional calculations of the liquid deuterium Hugoniot, reshock, and reverberation timing", *Phys. Rev. B.*, 68, 064204 (2003).

[6] L. CAILLABET, S. MAZEVET, P. LOUBEYRE, "Multiphase equation of state of hydrogen from *ab initio* calculations in the range 0.2 to 5 g/cc up to 10 eV", *Phys. Rev. B*, **83**, 094101 (2011).

[7] K. MATSUISHI et al., "Equation of state and intermolecular interactions in fluid hydrogen from Brillouin scattering at high pressures and temperatures", J. Chem. Phys., **118**, 10683 (2003).

[8] P. LOUBEYRE et al., "X-ray diffraction and equation of state of hydrogen at megabar pressures", *Nature* (London), **383**, p. 702-704 (1996).

[9] F. DATCHI et al., "Extended and accurate determination of the melting curves of argon, helium, ice (H₂0), and hydrogen (H₂)", *Phys. Rev. B*, **61**, p. 6535-6546 (2000).

[10] A. Y. POTEKHIN, G. CHABRIER, "Thermodynamic functions of dense plasmas: analytic approximations for astrophysical applications", *Contrib. Plasma Phys.*, **50**(1), p. 82-87 (2010).

Modélisation des transitions de phase martensitiques par champ de phase avec chemins de réaction

Les microstructures obtenues lors de changements de phase sont généralement très complexes et possèdent plusieurs échelles caractéristiques, comme par exemple les aiguilles de martensite dans les alliages à base de fer, elles-mêmes constituées d'un ensemble de lamelles de phases différentes. Cette richesse de microstructures est le résultat de la compétition entre une énergie élastique, responsable des interactions à longue portée entre les différentes phases, et une énergie cristalline, extrêmement complexe car possédant de nombreux minima représentant l'énergie de chacune des phases. Une modélisation précise des changements de phase nécessite à la fois une description rigoureuse de ce paysage énergétique et un coût de calcul permettant la modélisation sur de grands volumes.

C. Denoual • A.-M. Caucci • L. Soulard • Y.-P. Pelligrini CEA - DAM Île-de-France

es changements de phase martensitiques jouent un rôle crucial dans le comportement de certains alliages, essentiellement en raison des déformations importantes mises en jeu et de leur couplage avec les sollicitations macroscopiques. Ils sont en général très rapides (à petite échelle, ils peuvent se produire en quelques picosecondes), ce qui limite considérablement les possibilités d'observations résolues en temps et contraint à utiliser des techniques de simulation pour en comprendre les mécanismes. La plupart de ces mécanismes peuvent être étudiés par dynamique moléculaire, en particulier pour les sollicitations très brèves produites par exemple par une onde de choc. Cette méthode est cependant limitée à des temps de simulations relativement courts, et par conséquent à des échelles de microstructures relativement petites. En effet, un million de pas de temps de 1 fs correspondent à une propagation des ondes élastiques sur seulement 3 mm, limitant de fait l'apparition de microstructures aux échelles supérieures. Si l'émergence de moyens de calculs téraflopiques a permis d'étendre les volumes accessibles par la dynamique moléculaire à une fraction de micromètre cube (10 milliards d'atomes = $0,5 \,\mu m$ au cube), l'obtention de microstructures à l'échelle de quelques dizaines de microns nécessite une révolution d'une autre nature, notamment pour réaliser des simulations sur des temps longs, de l'ordre de la microseconde.

La méthode que nous proposons en [1] permet de telles simulations à l'échelle mésoscopique, tout en assurant l'équivalence énergétique, pour l'essentiel des déformations entre phases, avec les simulations de dynamique moléculaire réalisées à la même échelle. L'ensemble de ces états intermédiaires entre phases (que nous englobons sous le terme de chemin de réaction, ou «reaction pathway») peuvent être très complexes, notamment en raison de l'existence de phases intermédiaires [2]. Notre



Figure 1. (a) Passage d'une structure CFC à une structure CC, puis de nouveau CFC par déformations successives (les mailles des trois structures sont superposées en teintes pâles). On remarque que la première et la dernière maille peuvent se déduire l'une de l'autre par une simple rotation de 90°.

(b) Chemins de réaction menant d'une phase à une autre (les conditions de projections en 3D sont données en [1]). La phase cubique centrée (CC-1) produite à partir de la phase CFC centrale peut se transformer en trois phases CFC, dont deux sont d'orientation différente de la phase initiale (CFC-1.1 et CFC-1.2). Le cycle CFC→CC→CFC peut continuer, suivant des déformations différentes des deux premières transformations et ne pouvant pas s'en déduire par une combinaison linéaire. L'ensemble des variantes accessibles depuis la phase CFC initiale est donc infini.



Figure 1. Simulation à déformation imposée. (a) La martensite (en couleurs) forme une microstructure complexe dans l'austénite initiale (en gris). Une des phases (en vert) apparait comme un état intermédiaire seulement dans les simulations à grande échelle (dim = 7). (b) Les fractions volumiques en DM (disques) sont utilisées pour ajuster le paramètre de cinétique de réaction du PF-RP (traits pointillés).

modélisation des transitions martensitiques, de type «phase field», utilise les chemins de transitions comme constituants élémentaires, que l'on peut connecter pour former un arbre de chemin de réaction aux nombreuses ramifications (**figure 1**).

Pour valider ce concept de «Phase field » par «Reaction pathway» (PF-RP), nous avons utilisé une transition martensitique modèle, caractérisée par la transformation d'une phase Cubique centrée (CC) en une phase Cubique à faces centrées (CFC) pour un alliage de fer et de nickel. Trois types de simulations ont été réalisés.

Dans un premier temps, un potentiel de Dynamique moléculaire (DM) issu de la littérature (Embeded Atom Model, EAM) a été utilisé pour définir les chemins de réaction entre les différentes phases, les énergies le long de ces chemins, et les modules de raideurs des phases de départ et d'arrivée. L'ensemble de ces données définit un chemin de réaction, ensuite dupliqué et tourné pour former un arbre complexe de sorte que le comportement global respecte l'ensemble des symétries du cristal.

Nous avons ensuite comparé, pour une même échelle et une même sollicitation, une simulation réalisée en PF-RP et une simulation de dynamique moléculaire. Le seul paramètre libre, la cinétique de réaction, a été ajusté pour restituer les temps de nucléation des phases (**figure 2**). La très bonne concordance entre les différentes phases obtenues [1], malgré le caractère très instable de cette transition, permet de considérer les simulations PF-RP comme un bon substitut des simulations DM, pour un coût de calcul inférieur de plusieurs ordres de grandeurs. Pour la troisième simulation (**figure 2**), dont les dimensions et la durée ont été multipliés par 7 relativement aux simulations de validation, la microstructure obtenue est complexe, avec en particulier une phase intermédiaire (**figure 2**, en vert) disparaissant en fin de simulation.

Cette première étude ouvre la voie aux simulations de transitions de phase martensitiques sur des volumes de plusieurs micromètres cubes. L'utilisation de chemins de réaction assemblés en arbre rend extrêmement flexible la définition du paysage énergétique. Elle autorise notamment l'étude des transformations très complexes pour lesquelles des états intermédiaires et instables peuvent être introduits. L'utilisation de données synthétiques pour définir les chemins (énergie sur les chemins, raideurs, etc.) nous permet d'envisager un couplage fort avec les méthodes *ab initio* que nous développons [3].

RÉFÉRENCES

[1] C. DENOUAL, A.-M. CAUCCI, L. SOULARD, Y.-P. PELLEGRINI, "Phase field reaction pathway kinetics of martensitic transformations in a model Fe₃Ni alloy", *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 035703 (2010).

[2] C. CAYRON, F. BARCELO, Y. DE CARLAN, "The mechanisms of the fcc-bcc martensitic transformation revealed by pole figures", *Acta Mater.*, **58**, p. 1395-1402 (2010).

[3] B. AMADON, F. LECHERMANN, A. GEORGES, F. JOLLET, T. O.WEHLING, A. I. LICHTENSTEIN, "Plane-wave based electronic structure calculations for correlated materials using dynamical mean-field theory and projected local orbitals", *Phys. Rev. B*, **77**(20), 205112 (2008).

Collectivité nucléaire avec l'interaction de Gogny pour 1700 noyaux

L'étude des propriétés des noyaux dans le cadre de théories microscopiques a été menée avec succès au cours des trente dernières années au CEA-DAM Île-de-France. Forte de ces acquis, une étude systématique a été conduite pour les états de vibration et de rotation pour environ 1 700 noyaux liés possédant un nombre pair de protons (Z) et de neutrons (N) couvrant la table des éléments depuis le néon (Z = 10) jusqu'aux actinides et transactinides (Z > 90). Ces travaux de grande ampleur ont pu être menés grâce aux moyens de calcul du CCRT.

J.-P. Delaroche • M. Girod • H. Goutte • S. Hilaire • S. Péru • N. Pillet CEA - DAM Île-de-France J. Libert Institut de Physique Nucléaire, IN2P3-CNRS, Orsay G. Bertsch Institute of Nuclear Theory, University of Washington, Seattle, USA

a structure des noyaux est étudiée à l'aide de modèles microscopiques utilisant la force de Gogny. C'est dire que ces modèles n'impliquent aucun paramètre libre (sauf ceux entrant dans la spécification de cette force). Parmi ces modèles décrivant au-delà du champ moyen Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) les propriétés du noyau, il en est un, basé sur la méthode dite de la Coordonnée Génératrice, qui est à même de décrire les états collectifs (vibration et rotation) de basse énergie dans les noyaux pair-pair dont le nombre de protons (*Z*) et de neutrons (*N*) diffèrent des nombres magiques *Z*(*N*) = 8, 20, 28, 50, 82, 126...

Ce modèle collectif repose sur un Hamiltonien où cinq degrés de liberté associés aux excitations collectives de basse énergie et de parité positive sont inclus. Dans ce Hamiltonien, les composantes d'énergie cinétique et potentielle sont déterminées à partir de calculs de champ moyen HFB - sous contraintes.

Les enjeux

Cette description des états excités des noyaux, initiée il y a de nombreuses années, s'est révélée pertinente dans l'interprétation d'une variété d'expériences menées sur la diffusion d'électrons (Saclay), la coexistence de formes (SPIRAL au GANIL), la spectroscopie gamma de noyaux exotiques (SPIRAL et Michigan State University, USA), les états superdéformés, le processus de fission, les isomères de forme dans les actinides, etc.

Puisque cette approche bâtie sur un modèle collectif semble être très prometteuse, pourquoi ne pas en tester les performances pour les quelques centaines de noyaux ayant des propriétés collectives connues expérimentalement ? Pourquoi ne pas étendre l'étude bien au-delà pour prédire



Figure 1. Énergies des premiers états 2⁺. Comparaison entre valeurs expérimentales pour 537 noyaux et les prédictions du modèle.





quelles sont les propriétés spectroscopiques de noyaux exotiques qui seront accessibles à l'expérience auprès de SPIRAL2 au GANIL, et pour prédire aussi les limites en *Z* et *N* au-delà desquelles les noyaux ne sont plus liés, une information utile aux scénarios de nucléosynthèse stellaire? Ce pari a été mené à bien grâce aux grands moyens de calcul disponibles au CEA.

L'étude

La comparaison entre de nombreux résultats expérimentaux et les calculs a permis d'évaluer la figure de mérite du modèle. Cette comparaison ne peut être décrite en détail ici, mais elle est disponible dans une publication récente [1]. En particulier, nous pouvons conclure que les vibrations harmoniques sont extrêmement rares dans les noyaux et que les prédictions du modèle sont d'autant meilleures que les noyaux sont éloignés des nombres magiques. L'accord entre calculs et mesures est bon pour les noyaux déformés, aussi bien dans la région définie par 30 < Z < 40que dans les terres rares (60 < Z < 76), les actinides et transactinides (Z > 90). Des illustrations sont données sur la figure 1 pour l'énergie du premier état excité 2⁺ des noyaux connus, et sur la figure 2 pour les probabilités réduites B(E2) de transition quadrupolaires électriques de cet état excité vers l'état fondamental, sachant que la valeur de B(E2) est inversement proportionnelle à la durée de vie du niveau excité.

Conclusion

L'étude systématique et à grande échelle qui a été menée permet de conclure que le modèle microscopique utilisé pour décrire les propriétés collectives d'environ 1 700 noyaux est globalement satisfaisant et qu'il permet une certaine confiance dans les prédictions. Cette étude a également montré que les transitions sans transfert de moment angulaire devraient impliquer des degrés de liberté supplémentaires. D'ores et déjà, nous pouvons dire que de nombreuses prédictions se révéleront précieuses pour l'interprétation de mesures faites dans le futur à SPIRAL2 (GANIL), et pour enrichir les modèles de réaction nucléaire servant à l'évaluation de données utiles au programme Simulation de la DAM.

RÉFÉRENCES

[1] J.-P. DELAROCHE *et al.*, "Structure of even-even nuclei using a mapped collective Hamiltonian and the D1S Gogny interaction", *Phys. Rev. C*, **81**, 014303 (2010).

Surveillance à grande distance des éruptions volcaniques

Les éruptions volcaniques génèrent des ondes infrasonores (ondes acoustiques ~ 0,01 à 20 Hz) qui se propagent sur de grandes distances dans l'atmosphère avec une faible atténuation. Ces ondes peuvent être détectées par des antennes de capteurs de pression très sensibles appelés microbarographes. Le Système de surveillance international (SSI) de l'Organisation du traité d'interdiction complète des essais nucléaires (OTICE) détecte fréquemment des éruptions volcaniques. Le volcan Sarychev, situé à Ostrov Matua, dans les îles Kouriles, est rentré dans une phase éruptive majeure en juin 2009. Aucune station sismique n'a pu enregistrer des signaux, alors que des ondes infrasonores ont été détectées à plus de 6 400 km de distance. Ces signaux sont utiles pour déduire la chronologie des explosions, mieux comprendre le processus des phases d'injection de cendres dans l'atmosphère, et améliorer la prévision de transport et la dispersion de ces cendres. Ces enregistrements sont également utiles pour valider des modèles de propagation des infrasons dans la haute atmosphère et améliorer les outils opérationnels de surveillance des explosions aériennes.

R. S. Matoza • A. Le Pichon • J. Vergoz • P. Herry • J.-M. Lalande CEA - DAM Île-de-France H. Lee • I. Che Earthquake Research Center, Korea Institute of Geoscience and Mineral Resources, Korea A. Rybin Sakhalin Volcanic Eruptions Response Team, Institute of Marine Geology and Geophysics, Yuzhno-Sakhalinsk, Russia

e volcan Sarychev est un strato-volcan andésitique (altitude de 1 446 m) situé au nord-ouest de Matua Ostrov (île Matua), dans les îles Kouriles (**figure 1**). Il est rentré dans une phase éruptive majeure entre le 11 et 16 juin 2009. Ces éruptions ont été observées sur des images satellites acquises le 11 juin 2009. Elles ont montré des anomalies thermiques et des émissions de cendres [1]. Le 12 juin 2009 à 22h16 UT, des photographies spectaculaires de la colonne d'éruption ont été prises par les astronautes de la Station spatiale internationale (ISS) (**figure 1, photo en médaillon**). Ces photos ont permis de visualiser des nuées ardentes sur le flanc du volcan ainsi que les cendres dispersées en altitude provenant d'éruptions antérieures.

En raison de l'éloignement des Kouriles, des observations au sol sont rares. En particulier, les stations sismiques les plus proches (Paramushir, Iturup et de Sakhaline situées à des distances de 352 km, 512 km et 800 km, respectivement) n'ont rien détecté. Un domaine actif de recherche concerne l'étude de la propagation des infrasons dans l'atmosphère. Les volcans constituent des sources répétitives connues très utiles pour calibrer des modèles de propagation. Les éruptions rapprochées du volcan Sarychev permettent ici de mieux quantifier les effets de la variabilité temporelle de l'atmosphère sur la propagation [2]. Par ailleurs, bien que les îles Kouriles soient peu peuplées, elles sont situées dans un couloir aérien très fréquenté reliant l'Europe, l'Amérique du Nord et l'Asie septentrionale. Une surveillance efficace du volcanisme des îles Kouriles est donc essentielle pour la sécurité aérienne [3].

Observations

Le SSI comprend un réseau mondial de stations infrasonores conçu pour détecter et localiser les explosions atmosphériques partout sur la planète. Chaque station se compose d'une antenne d'au moins 4 capteurs avec une réponse fréquentielle plate de 0,01 à 8 Hz (échantillonné à 20 Hz). La **figure 1** présente les stations infrasons du



Figure 1. Observations des infrasons générés par l'éruption du volcan Sarychev en juin 2009.

Les explosions ont été enregistrées par 6 stations du SSI ainsi que quelques stations en Corée du Sud. Le triangle rouge indique la position du volcan Sarychev, les triangles bleus indiquent les stations infrasons ayant enregistré l'éruption, les triangles noirs indiquent les stations infrasons qui n'ont pas enregistré l'éruption. Les signaux sont observés à longue distance à l'ouest du volcan dans la direction des vents stratosphériques dominants.

En médaillon: photographie du panache de cendre prise à 22h16 UT le 12 juin 2009 à partir de la Station spatiale internationale (ISS). Crédit: NASA Earth Observatory.



Figure 2. Résultats du traitement Progressive Multi-Channel Correlation (PMCC). Les stations sont classées en

fonction de leur distance par fonction de leur distance par rapport au volcan. Les azimuts des détections sont affichés relativement à la direction de propagation attendue (échelle d'azimut constante pour chaque station). L'échelle de couleur correspond au log₁₀ (N) où N est le nombre de détections PMCC dans une fenêtre de taille 0,1° en azimut et 3,5 minutes en temps. Les détections sont alignées en corrigeant les temps d'arrivées d'une vitesse moyenne de propagation de 0,33 km/s.

SSI et une station supplémentaire (YAG) exploitée par l'Institut Coréen en Géosciences et Ressources Minérales (KIGAM), qui sont utilisées dans cette étude.

La **figure 2** montre les résultats de l'application de l'algorithme Progressive Multi-Channel Correlation (PMCC) pour la détection **[4]**. Cette méthode permet de mesurer les caractéristiques du front d'onde cohérent traversant la station en tenant compte de la corrélation entre le temps des retards successifs sur les capteurs **[4]**. La **figure 2** présente toutes les détections PMCC avec un azimut +/-15° autour de la direction de propagation attendue entre le volcan et chaque station. Les détections sont alignées sur une même base de temps pour en faciliter l'association. Le décalage temporel appliqué correspond à la distance horizontale entre la source et chaque station divisée par une vitesse moyenne de propagation fixée à 0,33 km/s.

Entre le 11 et 16 juin 2009, on note une séquence identique de signaux générés sur les stations IS44, IS45, IS30, et YAG. Des signaux de plus grande amplitude sont observés à IS31 (Kazakhstan) à une distance de 6433 km. L'absence de signaux sur les stations les plus proches (IS53, IS39 et IS59) est expliquée par des effets combinés de niveau local de bruit et de propagation. À cette période de l'année, les vents stratosphériques (entre 40 et 50 km d'altitude) soufflent d'est en ouest favorisant la propagation des ondes à l'ouest de la source. Les détections observées sur la **figure 2** sont compatibles avec une propagation d'ondes dans un guide stratosphérique (entre 0 et 45 km d'altitude environ). Compte tenu de la direction de ces vents en altitude, la position relative des stations IS53, IS59 et IS39 par rapport au volcan explique l'absence de détection.

Discussion et conclusions

Des éruptions volcaniques explosives peuvent rejeter des quantités importantes de cendres dans l'atmosphère en

perturbant le trafic aérien. L'éruption du volcan Sarychev en juin 2009 a engendré des panaches de cendres, annulant 65 vols et déroutant plus de 20 trajectoires. La couverture du réseau sismique ne permet pas une surveillance des volcans dans cette région. Les stations infrasons représentent un moyen d'observation efficace pour en améliorer la surveillance. La couverture du SSI est déjà suffisante pour fournir des informations utiles sur les activités volcaniques à une échelle globale [2]. Les études en cours permettent de quantifier les performances de ce réseau en terme de capacité de détection en fonction du bruit ambiant et des conditions de propagation [5]. De tels travaux aideront à la définition d'un réseau infrason optimal pour surveiller à grande distance une région volcanique donnée.

RÉFÉRENCES

[1] SVERT (Sakhalin Volcanic Eruptions Response Team), "Widespread plumes from large 11-16 June 2009 eruption", *Bulletin of the Global Volcanism Network*, Monthly report 06/2009, 34:06, Smithsonian Global Volcanism Program (2009); <u>http://www.volcano.si.edu/world</u>.

 [2] R. S. MATOZA, A. LE PICHON, J. VERGOZ, P. HERRY, J.-M. LALANDE, H. LEE, I. CHE, A. RYBIN, "Infrasonic observations of the June 2009
 Sarychev Peak eruption, Kuril Islands: Implications for infrasonic monitoring of remote explosive volcanism", *J. Volcanol. Geotherm. Res.*, 200, p. 35-48 (2011); doi:10.1016/j.jvolgeores.2010.11.022.

[3] C. NEAL, O. GIRINA, S. SENYUKOV, A. RYBIN, J. OSIENSKY, P. IZBEKOV,
 G. FERGUSON, "Russian eruption warning systems for aviation",
 Nat. Hazards, 51(2), p. 245-262 (2009).

[4] Y. CANSI, "An automatic seismic event processing for detection and location - the PMCC method", *Geophys. Res. Lett.*, **22**(9), p. 1021-1024 (1995).

[5] A. LE PICHON, J. VERGOZ, E. BLANC, J. GUILBERT, L. CERANNA, L. EVERS, N. BRACHET, "Assessing the performance of the International Monitoring System's infrasound network: Geographical coverage and temporal variabilities", *J. Geophys. Res.-Atmos.*, **114**, D08112 (2009).

Caractérisation des phénomènes de striction en dynamique ultra-rapide à l'aide d'une caméra unique

La compréhension physique des mécanismes de ruine (striction puis fragmentation d'un ensemble mécanique) implique la réalisation d'expériences élémentaires au cours desquelles les matériaux subissent de grandes déformations, pour différents types de géométrie et de trajets de chargement. Cet article illustre une telle situation dans le cas d'un cylindre en cuivre mis en expansion par explosif. Afin de caractériser le comportement de l'éprouvette, des systèmes d'imagerie ultra-rapide, grand champ et très résolus, analogiques aujourd'hui mais en mutation vers des solutions « tout numérique », sont mis en œuvre. Nous décrivons ici l'accès à l'évolution de l'état de surface au cours du temps par la mise en place d'un système d'acquisitions stéréoscopiques en insistant sur les spécificités liées à la très haute cadence des prises de vue, aux grandes déformations des objets analysés et au contexte pyrotechnique.

G. Besnard • J.-M. Lagrange CEA - DAM Île-de-France F. Hild • S. Roux LMT-Cachan, ENS Cachan / CNRS / UPMC, UniverSud Paris, Cachan C. Voltz CEA - Valduc

our les applications en détonique où les objets subissent de grandes déformations (parfois au-delà de 100%) pendant des temps très courts (moins de 100 µs), la cinématographie ultra-rapide est un moyen incontournable. La mise en place d'un système stéréoscopique permet, de plus, d'accéder à des informations tridimensionnelles liées à l'état de surface, grandeurs qui nous intéressent tout particulièrement dans le cadre de la caractérisation de la striction. En couplant la stéréovision avec la corrélation d'images numériques [1], grâce au recours à un marquage de type «mouchetis» de la surface de l'objet étudié, l'objectif est de fournir, par une analyse automatisée, une caractérisation de la qualité de la surface au cours du temps ainsi que les temps d'apparition des localisations de déformation. Tous les principes des techniques précitées ainsi que les éléments de caractérisation complète de nos chaînes optiques (distorsion, résolution) sont décrits

en détail dans [2,3]. Nous nous concentrons sur leur déclinaison à des expériences de détonique en analysant plus particulièrement l'implantation sur dalle de tir des mesures, la problématique de l'étalonnage stéréoscopique ainsi que l'association univoque, spatiale et temporelle, préalable à la reconstruction 3D.

Spécificité de la reconstruction de surfaces de matériaux déformés par explosif

Comme illustré sur la **figure 1**, un système stéréoscopique réside dans l'observation d'une scène selon différents angles de vue. Pour nos applications, compte tenu des fortes cadences d'acquisition (de l'ordre du demi-million d'images par seconde pour l'exemple traité), du champ et de la définition nécessaires (impliquant des images de taille 1200x1200 pixels), nous avons opté pour l'utilisation de caméras analogiques basées sur l'utilisation d'un miroir



Figure 1. Mise en œuvre expérimentale de la visée stéréoscopique à l'aide de deux miroirs de renvoi filmés par une caméra mécano-optique unique, et exemple d'images gauche et droite obtenues à l'aide de ce système d'imagerie, *via* un éclairement de la scène par deux flashes pyrotechniques.



Figure 2. Évolution de la surface du cylindre en expansion (maillage bleu), pour trois temps séparés d'environ 20 μs, superposée à la prévision 3D axisymétrique issue du code de calcul hydrodynamique Hésione.

tournant distribuant 25 images sur un film argentique. Avec cette technologie, les imageurs ne sont pas synchronisables si bien que deux visées sont artificiellement créées par **la mise en place de deux miroirs de renvoi filmés par une unique caméra [3]**.

L'accès à des informations 3D est basé sur l'analyse de paires d'images bidimensionnelles et nécessite une incontournable étape **d'étalonnage stéréoscopique**. L'adéquation avec les contraintes de «champ de tir» et le manque de souplesse de l'acquisition analogique (nécessitant un développement, une numérisation et un recalage spatial des images) ont conduit à la mise en place définitive de mires calibrées en forme de livre ouvert **[3,4]** qui sont détruites au cours de l'expérience.

Les associations spatiale (relations univoques entre les images gauche et droite) et **temporelle** (suivi d'un point au cours de sa déformation) sont basées sur la corrélation d'images **[1,2]** dont les performances sont intimement liées au marquage initial réalisé sur la surface de l'objet. Dans des applications les plus courantes **[1,2]**, ce marquage est obtenu par mouchetis de peinture. Pour nos expériences, cette opération a été adaptée de manière à ne pas perturber le phénomène, à obtenir un fort contraste et à être résistant au passage des chocs débouchant sur la surface : la gravure par attaque laser **[3]** a permis de concilier ces exigences.

La présence de grands déplacements 3D implique des mouvements d'amplitude importante sur les images enregistrées qui perturbent l'emploi de techniques basées sur la corrélation, malgré les stratégies multi-échelles qu'elles incorporent [2]. Une phase de prétraitement a été développée de manière à stabiliser la séquence en anticipant au mieux l'expansion apparente de l'objet. Cette technique est rendue possible grâce au couplage avec les résultats issus du code hydrodynamique Hésione, produit par le CEA-DAM, qui conduit à initialiser de façon plus optimale l'algorithme de corrélation, lui permettant d'atteindre des champs résolus et fiables.

Tous les points précédents étant maîtrisés, la reconstruction 3D de la surface en découle (voir un exemple sur la **figure 2**). L'estimation des incertitudes, pour les différents postes de dégradation des mesures expérimentales, est ensuite menée par propagation d'erreurs. Cette fourniture permet de chiffrer la confiance sur les positions résultantes mais aussi de prédire les améliorations à venir en fonction des progrès attendus sur les dispositifs expérimentaux, et notamment les caméras.

Perspectives

Cet article démontre la faisabilité de la reconstruction de l'état de surface d'un objet en grande déformation par imagerie ultra-rapide et illustre son application aux études expérimentales de la localisation, cruciales pour la validation des approches numériques. Aujourd'hui, la principale voie de progrès réside dans l'amélioration de la technique d'imagerie avec l'emploi de plusieurs caméras dont la résolution serait augmentée. Un moyen prometteur de ce type est en cours de développement au sein du CEA-DAM [5] ; il est basé sur un éclairage laser diffus et ultra-bref (quelques ns) couplé à une caméra numérique intensifiée.

RÉFÉRENCES

[1] M. A. SUTTON, J.J. ORTEU, H. W. SCHREIER, "Image Correlation for Shape, Motion and Deformation Measurements: Basic Concepts, Theory and Applications", Springer, Berlin, Germany, 2009.

[2] G. BESNARD, F. HILD, S. ROUX, "Finite-element displacement' fields analysis from digital images: application to Portevin-Le Chatelier bands", *Experimental Mechanics*, **46**(6), p. 789–803 (2006).

[3] G. BESNARD, Caractérisation et quantification de surfaces par stéréocorrélation pour des essais mécaniques du quasi statique à la dynamique ultra-rapide, Thèse de doctorat, École normale supérieure de Cachan (2010).

[4] G. BESNARD et al., "Characterization of necking phenomena in highspeed experiments by using a single camera", EURASIP Journal on Image and Video Processing, Vol. 2010, ID 215956 (2010).

[5] P.-A. FRUGIER et al., "Laser imaging: picturing high-explosive driven experiments with nanoseconds to picoseconds exposure times", Proc. 29th International Congress on High-Speed Imaging and Photonics, Morioka, Japan, 20-24 Septembre 2010.

Contrôle des effets des radiations dans les fibres optiques phosphosilicates:exemples d'applications dans différents domaines du nucléaire

Les études menées en collaboration entre nos différents laboratoires ont permis d'améliorer notre compréhension des mécanismes induits à l'échelle microscopique sous irradiation dans les fibres optiques dopées au phosphore. Les défauts ponctuels à l'origine de la forte dégradation de ces fibres sous irradiation ont été pour la plupart identifiés ainsi que leurs mécanismes de génération. À partir de ces études fondamentales, il a été possible de montrer la faisabilité de diverses applications utilisant ces fibres optiques dans différents domaines du nucléaire. La première, basée sur leur forte sensibilité aux radiations, concerne un outil de dosimétrie *in situ* résolu spatialement. La seconde, rendue possible par le contrôle de la génération de certains des défauts phosphore sous irradiation, concerne une fibre optique amplificatrice tolérante aux radiations rencontrées dans l'espace.

S. Girard • C. Marcandella • N. Richard CEA - DAM Île-de-France					
G. Origlio • M. Vivona • Y. Ouerdane • A. Boukenter Laboratoire Hubert Curien, UMR-CNRS 5516, Saint-Étienne, France					
M. Cannas • R. Boscaino Laboratoire LAMP, Universita di Palermo, Palermo, Italie					
B. Cadier • T. Robin • A. Laurent iXFiber SAS, Lannion, France					
S. Quenard • N. Authier CEA-Valduc					

intégration des fibres optiques est de plus en plus considérée dans différents domaines du nucléaire tels que les applications spatiales, la physique des hautes énergies, les lasers de classe Mégajoule ou le nucléaire civil [1]. En effet, elles possèdent de nombreux avantages par rapport aux autres canaux de transport de l'information : leur immunité électromagnétique, leur grande bande passante, la possibilité de multiplexage, leurs faibles poids et volume. Cependant, leurs propriétés macroscopiques restent affectées par les radiations, principalement via trois mécanismes: l'atténuation induite par irradiation (RIA pour «Radiation-Induced Attenuation»), l'émission induite par irradiation et la compaction. Pour la majorité des applications, la RIA, qui correspond à une augmentation des pertes optiques linéiques de la fibre, reste le phénomène prépondérant. Toutes les fibres optiques n'ont pas la même sensibilité face à un environnement donné et pour un profil d'emploi donné. Plus particulièrement, les niveaux et les cinétiques de la RIA dépendent fortement de la composition de la matrice vitreuse constituant la fibre, les éléments incorporés en cœur ou en gaine optique, le procédé de fabrication... Dans cet

article, nous limitons notre étude aux fibres phosphosilicates, *i.e.* celles possédant un cœur de silice dopée avec du phosphore. Ces fibres sont différentes de celles dopées avec du germanium issues du marché des télécommunications. Les fibres phosphosilicates sont en revanche très utilisées pour la fabrication de capteurs ou, en association avec des terres rares (erbium, ytterbium), pour la fabrication de fibres amplificatrices utilisées pour des lasers, amplificateurs et pour la télédétection par laser.

Les fibres optiques phosphosilicates sont connues pour être parmi les plus sensibles aux radiations. Ceci s'explique par les propriétés des défauts relatifs au phosphore qui absorbent fortement depuis l'ultraviolet jusqu'à l'infrarouge et sont très stables à température ambiante. Différentes techniques spectroscopiques ont été utilisées afin d'identifier ces défauts et leurs mécanismes de génération [2,3].

Leur grande sensibilité aux radiations peut être utilisée pour réaliser de la dosimétrie par fibre optique, en temps réel et résolue spatialement. De telles applications nécessitent que la RIA augmente



de manière linéaire avec la dose déposée dans le matériau. De plus, deux autres qualités sont essentielles pour la dosimétrie : une indépendance du facteur de conversion dose - RIA induite en fonction du débit de dose et en fonction de la température. Ceci a été vérifié pour différentes longueurs d'onde dans nos fibres phosphosilicates. La **figure 1** illustre l'évolution des pertes induites par irradiation en fonction de la dose déposée et du débit de dose à la longueur d'onde de 300 nm [4]. Cette longueur d'onde correspond à une zone spectrale où l'un des défauts induits par irradiation contribue de manière prépondérante et importante à la RIA. Ces travaux montrent qu'une dosimétrie in situ à cette longueur d'onde et avec une résolution spatiale de l'ordre du centimètre est envisageable.



Figure 2. Dépendance des pertes induites (RIA) à 1545 nm sous irradiation en fonction de la dose déposée en sortie des amplificateurs réalisés avec la fibre #1 (phosphosilicate) et la fibre #2 (phosphosilicate + cérium) [5].

Figure 1. Dépendance des pertes induites (RIA) à 300 nm sous irradiation en fonction de la dose déposée dans une fibre phosphosilicate pour différents débits de dose à température ambiante [4].

Pour les fibres amplificatrices co-dopées ytterbium et erbium, nous avons montré que leur forte dégradation provenait du co-dopage au phosphore utilisé pour favoriser les mécanismes d'amplification laser. Pour des applications spatiales, il convient de limiter la génération de ces défauts. Ceci est possible en co-dopant les fibres optiques avec du cérium [5]. Sous irradiation, les défauts relatifs au cérium et au phosphore sont en compétition pour le piégeage des charges libérées par ionisation. Le co-dopage cérium permet de diminuer sensiblement la concentration des défauts responsables de la dégradation de la fibre à 1545 nm, longueur d'onde d'émission des amplificateurs à fibre. La figure 2 compare la dégradation de deux amplificateurs à fibre optique, aux performances identiques avant irradiation. Le premier est réalisé avec une fibre phosphosilicate (#1) et le second avec une fibre co-dopée phosphore et cérium (#2). Ces travaux montrent la faisabilité de concevoir des amplificateurs optiques durcis pour le spatial.

En conclusion, la compréhension et le contrôle des effets induits par irradiation dans les fibres phosphosilicates a permis d'imaginer des applications dans divers domaines du nucléaire et du spatial.

RÉFÉRENCES

[1] S. GIRARD, Propriétés des défauts ponctuels à l'origine de la dégradation des fibres optiques et verres à base de silice en environnement radiatif, Habilitation à Diriger des Recherches, Université de Saint-Étienne, juin 2010.

[2] G. ORIGLIO et al., "Optical properties of phosphorusrelated point defects in silica fiber preforms", *Phys. Rev. B*, **80**, 205208-1 (2009).

[3] G. ORIGLIO et al., "Spectroscopic studies of the origin of radiation-induced degradation in phosphorus-doped optical fibers and preforms", J. Appl. Phys., **108**, 123103 (2010).

[4] S. GIRARD et al., "Feasibility of Radiation Dosimetry with Phosphorus-doped Optical Fibers in the UV-visible range of wavelengths", J. Non-Crys. Sol., **357**, p. 1871-1874 (2011).

[5] B. CADIER et al., Fibre optiques dopée terre rare résistante aux radiations et procédé de durcissement aux radiations d'une fibre optique dopée terre rare, brevet 1055617, dépôt juillet 2010.

Sensibilité aux radiations des composants électroniques avancés: effet de l'énergie des ions lourds

L'intégration technologique conduit à faire fonctionner les composants électroniques dans un volume de matériaux et avec un nombre de charges qui diminuent continuellement. On comprend dès lors que la sensibilité aux rayonnements des technologies électroniques tende à augmenter avec l'intégration. Nos travaux illustrent la nécessité de mieux connaitre la dimension des traces d'ions, particulièrement lorsque leur extension radiale devient du même ordre de grandeur que la taille du composant avancé.

M. Raine • P. Paillet • M. Gaillardin • J.-E. Sauvestre CEA - DAM Île-de-France G. Hubert ONERA, Toulouse A. Bournel Institut d'électronique fondamentale, CNRS, Université Paris-Sud, Orsay

a fiabilité des composants électroniques en milieu radiatif peut être affectée par le passage d'une particule ionisante. Le passage d'un ion dans la zone sensible d'un transistor crée ainsi une colonne de paires électron/trou par ionisation des atomes du milieu. Ce dépôt d'énergie est alors susceptible d'induire des effets Single-Event Effects (SEE), destructifs ou transitoires (erreur logique, changement d'état dans une cellule mémoire par exemple). Les sources de ces perturbations, issues de l'interaction rayonnement-matière, ne dépendent pas au premier ordre de la géométrie des composants. On observe ainsi une augmentation du taux d'erreur avec la diminution des dimensions des transistors. Les SEE ont longtemps été analysés en terme de dépôt d'énergie ionisante par la particule incidente, au travers du transfert linéique d'énergie ou LET (Linear Energy Transfer). L'utilisation de technologies de plus en plus intégrées remet en cause cette approche. En effet, la trace de l'ion -qui correspond au dépôt radial d'énergie le long de

son chemin dans la matière– a un diamètre du même ordre de grandeur, parfois même supérieur à la taille des transistors avancés actuels. Des dispositifs présentant de petits volumes actifs peuvent alors devenir sensibles à cette extension radiale de la charge déposée par l'ion, qui dépend de la masse et de l'énergie de l'ion. Il devient donc important de pouvoir modéliser de façon détaillée ce dépôt d'énergie, afin d'étudier l'influence sur la réponse électrique des composants.

Pour mener à bien cette étude, une chaîne de simulation a été développée (**figure 1**), combinant le code de simulation Monte Carlo Geant4 et le logiciel de simulation TCAD (Technology Computer Aided Design) Synopsys Sentaurus. Dans une première étape, les traces d'ions sont simulées à l'aide de Geant4, logiciel libre écrit en C⁺⁺ permettant de simuler les interactions particule-matière. Elles sont ensuite utilisées comme données d'entrée dans les simulations TCAD, afin de simuler la réponse d'un



Figure 1. Chaîne de simulation : de l'interaction particule-matière à la réponse d'un transistor isolé.



composant électronique irradié par des ions lourds. Cette méthodologie est appliquée à l'étude de la réponse sous irradiation de transistors SOI (Silicon On Insulator) de longueur de grille 70 nm [1]. Les simulations révèlent une dépendance de la réponse en fonction de l'énergie de l'ion, et non plus seulement en fonction du LET : deux ions de même LET et d'énergie différente peuvent induire des réponses distinctes [1]. Ces résultats correspondent aux tendances observées expérimentalement [2].

En pratique, lors d'un test de composants aux ions lourds, on procède à deux types d'irradiation : l'une en incidence normale, pour laquelle le dépôt d'énergie des ions a la valeur LET₀, l'autre avec un angle d'incidence θ , qui permet d'obtenir un dépôt d'énergie plus important par la relation $\text{LET}_{\text{eff}} = \text{LET}_0/\cos\theta$. La pertinence de cette équivalence est remise en question pour les dispositifs avancés [3]. Des résultats d'expérimentations réalisées au GANIL (Grand accélérateur national d'ions lourds) montrent des différences dans la réponse d'un transistor soumis à des irradiations à même LET effectif, effectuées en incidence normale ou avec un angle. Des simulations utilisant la même méthodologie complètent ces résultats, en élargissant à une plus large gamme de LET, d'ions et d'énergies. Les résultats obtenus mettent notamment en avant l'importance de l'orientation du faisceau d'ions incidents par rapport à la direction du canal du transistor.

L'étape suivante consiste à regarder les effets électriques non plus seulement au niveau du transistor élémentaire, mais à étendre l'étude au niveau circuit. Dans ce but, nous collaborons avec l'ONERA pour améliorer un outil de prédiction des SEE (MUSCA SEP³) dans les cellules mémoire. Jusqu'à présent, cet outil utilisait un dépôt d'énergie ponctuel, considérant uniquement la variation du LET avec la pénétration de l'ion dans la matière, sans tenir compte de la dimension radiale de la trace. L'influence de la prise en compte de la trace réelle de l'ion sur la prédiction SEE a donc été étudiée, en intégrant dans

Figure 2. Section efficace de SEU en fonction du LET pour une cellule SRAM SOI 65 nm, mesurée expérimentalement et simulée avec MUSCA SEP³ en utilisant soit l'approche ponctuelle, soit l'approche radiale.

cet outil les traces d'ions calculées à l'aide de Geant4 [4]. Cette nouvelle approche est validée par comparaison avec des données expérimentales issues de la littérature, pour des transistors SOI de trois générations différentes et pour des cellules SRAM SOI 65 et 45 nm. La figure 2 présente un exemple des résultats obtenus pour la cellule SRAM SOI 65 nm:on reporte la section efficace de SEU (Single Event Upset, changement d'état dans une cellule mémoire) en fonction du LET mesurée expérimentalement [5] (carrés vides bleus) et simulée avec MUSCA SEP³, soit en utilisant un dépôt d'énergie ponctuel (ronds rouges), soit en utilisant des traces d'ions issues de Geant4 (carrés pleins noirs). Les résultats obtenus avec l'approche radiale apparaissent bien meilleurs, permettant notamment la prédiction des erreurs multiples ou Multiple Bit Upsets (MBU), qui n'apparaissent pas avec l'approche ponctuelle.

L'influence de la prise en compte de la trace d'ion sur la prédiction SEE est ensuite étudiée pour différentes générations de SRAMs, et révèle un impact croissant avec l'intégration technologique.

L'étude de la sensibilité aux rayonnements des technologies avancées nécessite donc désormais une connaissance fine de la géométrie des traces ionisantes générées dans le semi-conducteur par le passage des particules.

RÉFÉRENCES

[1] M. RAINE *et al.*, "Effect of the ion mass and energy on the response of 70-nm S0I transistors to the ion deposited charge by direct ionization", *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **57**, p. 1892-1899 (2010).

[2] V. FERLET-CAVROIS *et al.*, "Statistical analysis of the charge collected in SOI and bulk devices under heavy ion and proton irradiation -Implications for digital SETs", *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **53**, p. 3242-3252 (2006).

[3] M. RAINE et al., "Influence of the ion energy on the angular dependence of SOI transistor response to heavy ion irradiation", *IEEE Transactions on Nuclear Science*, **57**, p. 3219-3227 (2010).

[4] M. RAINE *et al.*, "Impact of the radial ionization profile on SEE prediction for SOI transistors and SRAMs beyond the 32 nm technological node", *IEEE Transactions on Nuclear Science*, sous presse.

 [5] D. F. HEIDEL et al., "Single-event upsets and multiple-bit upsets on a 45 nm SOI SRAM", *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 56, p. 3499- 3504 (2009).

Modules d'élasticité du béryllium en fonction de la température

Depuis 2005, le volume de publications concernant le béryllium n'a cessé d'augmenter, en particulier dans le domaine des équations d'état et de la détermination des constantes d'élasticité [1,2]. Dans ce contexte, nous proposons la détermination des modules d'élasticité de polycristaux de béryllium par une méthode ultrasonore dans la gamme de température $T \in [300-1000]$ K. Du fait du comportement atypique du béryllium (coefficient de Poisson très faible), l'approche et l'interprétation des résultats sont globales afin de proposer des tendances d'évolution cohérentes des modules d'élasticité en fonction de la température.

M.-H. Nadal • L. Bourgeois • F. Clément • G. Ravel-Chapuis CEA - Valduc

e béryllium reste un matériau aux propriétés mécaniques exceptionnelles (coefficient de Poisson le plus faible de la famille des métaux, faible densité et comportement fragile) et optiques remarquables (transparent aux rayons X et modérateur neutronique) mais, pour lequel, les données expérimentales sont relativement rares.

L'objectif principal de ce travail est de réactualiser les données expérimentales concernant la dépendance en température des modules d'élasticité, en rappelant que les données de référence [3] datent de 1972, et que les derniers travaux expérimentaux de 2004 [4] ne traitent que de données expérimentales sur béryllium à la température ambiante.

Résultats

La détermination des modules d'élasticité suppose la connaissance de l'évolution de la masse volumique du matériau (pour le béryllium, 1,85 kg/m³ à la température ambiante, déduite du coefficient de dilatation linéaire en fonction de la température [2,5]) et des vitesses des ondes élastiques. Les vitesses des ondes de polarisation longitudinale et transversale du béryllium sont très élevées (**tableau 1**), comparées à d'autres matériaux (d'un facteur 2 par rapport à l'acier et 3 par rapport au tantale).

La compilation des données sur la masse volumique et les vitesses ultrasonores permet de déterminer de manière cohérente les différents modules d'élasticité, à savoir le module de Young (*E*), le module de cisaillement (*G*), le module d'incompressibilité adiabatique (B_S) et le coefficient de Poisson (v) [5]. Un des points forts de cette étude est de traiter les données expérimentales de façon globale, en s'efforçant de maîtriser les incertitudes relatives sur les vitesses. La détermination des tendances d'évolution des vitesses des ondes de polarisation longitudinale et transversale en fonction de la température permet une approche globale cohérente (**tableau 1**).

Modules d'incompressibilité adiabatique (B_S) et de cisaillement (G)

La tendance globale de $B_S(T)$ et G(T) est de décroître légèrement lorsque la température augmente (figures 1 et 2). Le domaine global de variation intégrant les incertitudes est indiqué par la région hachurée. Ces résultats conduisent aux commentaires suivants :

> nos résultats expérimentaux sont en bon accord avec les calculs *ab initio* [2] (figures 1 et 2, ligne en pointillés).
 La zone hachurée indique le domaine d'incertitude sur les données expérimentales alors que les calculs *ab initio*

Tableau 1. Évolution des vitesses d'ondes acoustiques en fonction de la température dans la gamme T ∈ [300; 1000] K.

Vitesses des ondes acoustiques	Température (K)	Incertitude relative (%)	Incertitude absolue (m.s ⁻¹)	Équation relative à l'évolution des vitesses en fonction de la température	
Vitesse de polarisation longitudinale V _L (m.s ⁻¹)	300	1	132	V_L à T ambiante	13 150
	1000	3	392	$V_{L} = f(T)$	13150 - 0,221 T + 6,14*10 ⁻⁵ T ²
Vitesse de polarisation transversale V _T (m.s ⁻¹)	300	1	90	V _⊤ à T ambiante	9030
	1000	2	178	$V_T = f(T)$	9092 - 0,231 T + 4,54 *10 ⁻⁵ T ²



Figure 1. Évolution du module de cisaillement (*G*) en fonction de la température.

Les données expérimentales issues de ce travail [5] pour deux séries d'échantillons (dont les procédés de fabrication sont différents) sont comparées à celles connues à la température ambiante [3,4] et aux calculs ab initio [2].



Figure 2. Évolution du module d'incompressibilité adiabatique (B_S) en fonction de la température.

Les données expérimentales issues de ce travail [5] pour deux séries d'échantillons (dont les procédés de fabrication sont différents) sont comparées à celles connues à la température ambiante [3,4] et aux calculs ab initio [2].

sont réalisés à 5% près [2];

> les résultats de la référence majeure de Rowland et al. [3] obtenus sur un monocristal de béryllium sont remis en question. Même s'il faut rester prudent en termes de transposition des données d'un monocristal à un polycristal, cette référence est la seule nous permettant de déduire les modules d'élasticité par les techniques

classiques de moyenne sur les cristallites (Voigt, Reuss et Hill). En comparant les résultats, les valeurs de B_s en fonction de la température apparaissent complètement différentes (**figure 2**). L'écart est moins significatif pour l'évolution globale de G(T).

Conclusion

Cet article résume nos travaux concernant la mise à jour de l'évolution des modules d'élasticité dans la gamme de température $T \in [300-1000]$ K (soit encore $T/T_f \in [0,2;0,65]$, avec T_f la température de fusion du béryllium) d'échantillons massifs de béryllium polycristallin isotrope. La méthode de caractérisation retenue est ultrasonore.

Les principaux faits marquants de ce travail sont: *i*) les valeurs de B_s et de G à la température ambiante sont cohérentes et proches de la valeur expérimentale [4]. Cette comparaison apporte des éléments de validation de nos résultats car les mesures expérimentales de cette référence ont été obtenues avec une grande précision à la fois sur monocristal et polycristal de béryllium; ii) l'évolution des modules d'élasticité dépend principalement du profil de densité en fonction de la température. La variation des vitesses des ondes élastiques vient pondérer la variation résultante des modules d'élasticité; iii) les évolutions de $B_s(T)$ et de G(T) sont sensiblement différentes de celles de la littérature. Cependant, l'accord global de l'ensemble des données acquises dans ce travail corroboré par les calculs ab initio [2] tend à remettre très fortement en question les mesures de Rowland *et al.* [3].

RÉFÉRENCES

[1] G. ROBERT, P. LEGRAND, S. BERNARD, "Modélisation *ab initio* du diagramme de phase solide à basse pression et haute température du béryllium", *Chocs Avancées 2009*, p.20-21 (2010).

[2] G. ROBERT, P. LEGRAND, S. BERNARD, "Multiphase equation of state and elastic moduli of solid beryllium from first principles", *Phys. Rev B*, 82, 104118 (2010).

[3] W.D. ROWLAND, "The determination of the elastic constants of beryllium in the temperature range 25 to 300°C", *J. Phys. F. Metal. Phys*, 2(2), p. 231-236 (1972).

[4] A. MIGLIORI, H. LEBDETTER, D. J. THOMA, T. W. DARLING, "Beryllium's monocrystal and polycrystal elastic constants", *J. Appl. Phys*, 95(5), p. 2436-2440 (2004).

[5] M.-H. NADAL, L. BOURGEOIS, "Elastic moduli of beryllium versus temperature: experimental data updating", *J. Appl. Phys*, **108**, 033512 (2010).

Diagnostics optiques et modélisation du procédé de projection plasma de nanomatériaux en voie liquide

La projection plasma de suspension de particules nanométriques permet d'obtenir des dépôts nanostructurés de faible épaisseur permettant d'améliorer les fonctions des pièces revêtues. Cette technique utilise une veine gazeuse à haute vitesse et haute température, générée par une torche plasma, dans laquelle est injectée une suspension du matériau fonctionnel. Les interactions entre le gaz à haute température et le liquide chargé sont nombreuses (fragmentation, évaporation du liquide, traitement thermique des particules) et complexes à analyser du fait des vitesses et du fort rayonnement lumineux généré par le plasma. En simulation numérique directe et sans hypothèse réductrice, les premières images de modélisation d'un train de gouttes et d'un jet continu d'eau pénétrant dans un jet plasma restituent complètement les séquences de fractionnement visualisées en caméra rapide au Laboratoire de projection thermique. Cette étape ouvre des voies prometteuses d'analyse de l'influence des différents paramètres intervenant dans le procédé.

E. Meillot • D. Damiani • C. Caruyer CEA - Le Ripault S. Vincent • J.-P. Caltagirone Institut de mécanique et d'ingénierie, École nationale supérieure de chimie, de biologie et de physique, Pessac

a projection plasma est un procédé pertinent pour déposer des matériaux nanostructurés sur des pièces industrielles de grandes dimensions de façon à améliorer leurs propriétés fonctionnelles. Elle utilise une source thermique (une torche à plasma, **figure 1**) pour accélérer et chauffer à haute température un jet gazeux dans lequel sont introduites les particules qui vont générer le dépôt par empilement successif. Les particules nanométriques sont mises en suspension dans un milieu aqueux ou un solvant pour être introduites dans le jet plasma. On parle ainsi de projection en voie liquide. L'optimisation du traitement des particules nécessite, d'une part, le diagnostic des interactions entre le jet liquide chargé et l'écoulement plasma et, d'autre part, entre cet écoulement et l'atmosphère environnante responsables du refroidissement de jet plasma par engouffrement d'air. Ce diagnostic peut être effectué par deux voies complémentaires, la visualisation et la modélisation.



Figure 1. Schéma de principe de la projection plasma.



Figure 2. Image des ligaments et des gouttelettes obtenue en cinématographie rapide.



Figure 3. Injection d'un jet liquide dans un jet plasma Ar/H₂ représenté par ses isothermes et ses isolignes de vitesse.

Visualisation du jet liquide et du plasma

L'interaction entre le jet liquide et le plasma thermique est observée par ombroscopie à l'aide d'un dispositif constitué d'une caméra rapide et d'une lampe flash (durée 100 ns) présentant une intensité lumineuse supérieure à la luminosité du plasma. La résolution spatiale de 0,6 μ m par pixel permet de visualiser finement la fragmentation du liquide (**figure 2**). La cinétique de fragmentation est observée avec une cadence de 20 000 images par seconde.

Modélisation numérique

Les calculs sont menés dans une configuration 3D avec un modèle instationnaire de l'écoulement plasma. La colonne plasma à l'intérieur de la torche est simulée par un modèle simple dénommé «modèle enthalpique» (basé sur l'échauffement du gaz par effet Joule); la forme de la colonne évolue en fonction du temps à travers le signal instantané de la tension d'arc [1]. Les aspects compressibles du plasma sont pris en compte à travers un modèle développé dans notre laboratoire [2]. La description des modèles complets et des hypothèses est accessible dans [3,4]. La résolution des équations de Navier-Stokes intégrées dans la bibliothèque THETIS est effectuée, en collaboration avec l'Institut de mécanique de l'ENSCBP à Pessac, sur les ordinateurs du centre de calcul de recherche et technologie (CCRT) du CEA-DAM Île-de-France.

Discussion

Les deux images (**figure 2 et figure 3**) représentent le comportement d'un jet liquide (diamètre 200 μ m et vitesse d'injection 22 m/s) analysées par visualisation expérimentale et par simulation numérique (temps 45 μ s). Les modes de fragmentation sont fonction du nombre de Weber (qui traduit le rapport de la déformation inertielle du fluide à

la tension de surface). Le comportement du jet liquide est particulièrement bien simulé: le mode «catastrophique» est ainsi correctement reproduit avec la génération des ligaments puis de leur désintégration sous l'effet du cisaillement intense dû au jet de plasma. Cette simulation apporte également les informations suivantes : le jet pénètre relativement peu dans le jet plasma (diamètre du jet 6 mm); son fractionnement commence à moins d'un millimètre et pour des vitesses relativement faibles (environ 170 m/s). Les gouttes générées sont donc loin du cœur du plasma visualisé par les températures supérieures à 8000 K en bas à gauche de la **figure 3**. L'injection de gouttes isolées modifie le mécanisme de fragmentation et la valeur du nombre de Weber: si le début du fractionnement se situe dans les mêmes zones. le fractionnement en mode «sac» est également correctement restitué avec la disparition de l'étape de formation des filaments.

RÉFÉRENCES

[1] E. MEILLOT *et al.*, "From D.C. Time-dependent Thermal Plasma Generation To Suspension Plasma Spraying Interactions", *J. Therm. Spray Technol.*, **18**(5-6), p. 857-886 (2009).

[2] C. CARUYER *et al.*, "A two-phase LES compressible model for plasma-jet interaction", Proc. of Turbulence et Interactions 2009, Ste LUCE, France, 2009 in Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Springer, **110**, p. 95-102 (2010).

[3] S. VINCENT *et al.*, "Eulerian-Lagrangian multiscale methods for solving scalar equations - Application to incompressible multiphase and multicomponent flows", *J. Comput. Phys.*, **229**(1), p. 73-106 (2010).

[4] C. CARUYER et al., "Modeling the first instant of the interaction between a liquid and a plasma jet with a compressible approach", *Surf. Coat. Technol.*, **205**(4), p. 974-979 (2010).

Topologie et maillage hexaédrique

La plupart des méthodes numériques s'appuient sur des maillages tétraédriques ou hexaédriques pour discrétiser leur domaine d'étude. L'utilisation de maillages hexaédriques est préférée pour certaines méthodes, mais la génération de ces maillages est beaucoup plus complexe que celle des maillages tétraédriques. Le critère de Delaunay assure l'existence et l'adaptation locale d'un maillage tétraédrique pour n'importe quel volume dont la frontière est discrétisée à l'aide d'une surface triangulaire. Un tel critère n'existe pas pour les maillages hexaédriques. Au contraire, ceux-ci sont pourvus d'une structure topologique globale qui complexifie grandement les traitements. Notre approche pour générer et modifier un maillage hexaédrique est donc de considérer initialement cette contrainte topologique tout en n'oubliant pas la géométrie du domaine d'étude.

F. Ledoux • J.-Ch. Weill CEA - DAM Île-de-France

Structure topologique des maillages hexaédriques

Topologiquement, un hexaèdre est composé de 6 faces, 12 arêtes et 8 sommets. Ces faces peuvent être regroupées en 3 ensembles de 2 faces composés chacun de 2 faces opposées dans l'hexaèdre. Les arêtes n'appartenant pas à ces 2 faces peuvent alors être regroupées et considérées comme topologiquement «parallèle». En se basant sur ces arêtes parallèles, on peut structurer, de proche en proche, l'ensemble d'un maillage hexaédrique en couches de mailles, ou *feuillets* (**figure 1**). Il en résulte une structuration globale, définie comme un arrangement simple de surface dans le maillage dual [1]; l'ajout ou la suppression d'un hexaèdre se traduit alors généralement par l'ajout ou la suppression d'un feuillet complet [2].

La plupart des algorithmes de génération de maillage repose sur des traitements locaux sans prendre en compte la structure topologique globale des maillages hexaédriques. C'est pourquoi ces algorithmes sont généralement limités à une catégorie spécifique de géométries.

Maillages hexaédriques fondamentaux

Généralement, l'utilisation d'un maillage hexaédrique pour discrétiser un domaine Ω est dictée par le choix de la méthode numérique ou par des contraintes géométriques. Il est ainsi nécessaire de porter une attention toute particulière à la frontière de Ω , notée $\partial\Omega$. Dans cette optique, nous introduisons la notion de *maillage fondamental* qui lie la topologie du maillage et la géométrie de $\partial\Omega$ [3]. Cette notion repose sur la définition de trois types de feuillets fondamentaux qui vont discrétiser le voisinage volumétrique de $\partial\Omega$ (figure 1). L'introduction de cette définition nous permet de caractériser le résultat des algorithmes de génération de maillages hexaédriques.



Figure 1.

(a) Un maillage hexaédrique.
(b) Un feuillet fondamental de type 1 où tous les hexaèdres sont situés le long de la même surface géométrique.
(c) Deux feuillets fondamentaux de type 3 qui capturent la courbe géométrique C.



Figure 2. (a,b) Maillage hexaédrique fondamental structuré par blocs. (c) Deux maillages non conformes, rendus conformes en (d).

Génération de maillages hexaédriques fondamentaux

Dans [4], nous avons proposé un algorithme pour la création d'un maillage hexaédrique fondamental pour des géométries de type CAO (conception assistée par ordinateur) dont les sommets géométriques sont de valence 4 au plus. Cet algorithme utilise abondamment les opérations d'insertion et de suppression de feuillets. Partant d'un maillage THex, obtenu à partir d'un maillage tétraédrique en découpant chaque tétraèdre en quatre hexaèdres de manière barycentrique, nous y insérons des feuillets fondamentaux. Ceux-ci sont déterminés par la résolution d'un système de contraintes linéaires sur la géométrie de $\partial \Omega$ et sur les arrangements possibles de feuillets fondamentaux. Une fois ceux-ci insérés, d'autres feuillets du maillage sont supprimés pour obtenir des maillages fondamentaux avec un minimum d'hexaèdres (figures 2a et 2b).

Modifications de maillages hexaédriques

Si générer un maillage hexaédrique pour un objet géométrique donné est difficile, la génération d'un maillage hexaédrique pour un assemblage d'objets géométriques l'est encore plus. Dans [5], un algorithme permettant de rendre conforme des maillages hexaédriques le long d'une interface commune a été proposé (**figures 2c et 2d**). Cet algorithme rend conformes deux maillages générés indépendamment pour des géométries partageant une même interface. Cet algorithme repose lui aussi sur les opérations d'insertion et de suppression de feuillets.

Conclusion

La génération d'un maillage s'avère l'une des étapes les plus consommatrices en temps «ingénieur» lors d'une simulation numérique. L'introduction de la notion de maillage fondamental, et les algorithmes proposés [4,5], nous permettront d'envisager une automatisation plus grande de cette étape. Ceci passera par des extensions de ces travaux à tout type de géométries et d'assemblages de géométries.

RÉFÉRENCES

[1] T. M. TAUTGES, S. KNOOP, "Topology modifications of hexahedral meshes using atomic data structure for parallel automated adaptive analysis", Proc. 12th International Meshing Roundtable, Santa Fe, NM (USA), Sept. 14-17 (2003), p. 415-423 (2003).

[2] F. LEDOUX, J. F. SHEPHERD, "Topological and geometrical properties of hexahedral meshes", *Eng. Comput.*, **26**(4), p. 419-432 (2010).

[3] F. LEDOUX, J. F. SHEPHERD, "Topological modifications of hexahedral meshes via sheet operations: a theoretical study", *Eng. Comput.*, **26**(4), p. 433-447 (2010).

[4] N. KOWALSKI, F. LEDOUX, M. L. STATEN, S. J. OWEN, "Fun sheet matching: towards automatic block decomposition for hexahedral meshes", *Eng. Comput.*, DOI: 10.1007/s00366-010-0207-5 (2010).

 M. L. STATEN, J. F. SHEPHERD, F. LEDOUX, K. SHIMADA, "Hexahedral Mesh Matching: Converting non-conforming hexahedral-to-hexahedral interfaces into conforming interfaces", *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 82(12), p. 1475-1509 (2010).

Synthèse et greffage d'un dérivé de bis-triazinyl-pyridine (BTP) sur une microbalance à quartz:application à la détection de lanthanides

Les bis-triazinyl-pyridine (BTP) sont connues dans le domaine de l'extraction liquide-liquide pour leur pouvoir complexant vis-à-vis des lanthanides [1]. Notre objectif a été d'établir la preuve de concept quant à l'utilisation de ces BTP greffées sur microbalance à quartz (QCM) comme récepteur moléculaire ou élément sensible à la détection. Aussi une nouvelle BTP munie d'une chaîne alkyle fonctionnalisée permettant le greffage chimique sur un support solide a été synthétisée. L'assemblage de la BTP sur les plaques d'or (utilisées pour la QCM) ainsi que les modifications chimiques de surface suite à l'exposition à des cations lanthanide (Ln³⁺) ont été suivis par XPS (Spectroscopie de photoélectrons X) et PM-IRRAS (Infrarouge en mode réflexion avec modulation de polarisation). Des essais de détection de cations néodyme (Nd³⁺) et europium (Eu³⁺) par QCM en milieu liquide, en utilisant la BTP greffée comme matériau sensible, ont été effectués.

A. Wuillaume CEA - Le Ripault D. Mercier • C. Méthivier • C.-M. Pradier Laboratoire de réactivité de surface, Université Pierre et Marie Curie - UMR CNRS 7609, LRC-CEA/UPMC/CNRS n°1, Paris N. Leconte • F. Suzenet • G. Guillaumet Institut de chimie organique et analytique, UMR CNRS 6005, LRC CEA M09, Université d'Orléans

a complexation sélective d'actinides (An(III)) / lanthanides (Ln(III)) en milieu liquide est un important challenge aussi bien pour la chimie fondamentale que pour la chimie appliquée. Un moyen de séparer les deux familles de cations consiste à utiliser un ligand azoté qui va complexer préférentiellement l'une ou l'autre famille. Aussi, les performances de nombreux ligands en termes de complexation, de sélectivité et de stabilité en milieu liquide radioactif ont été étudiées [2]. Des résultats prometteurs ont été obtenus avec des ligands 2,6-bis(5,6-dialkyl-1,2,4-triazi-3yl)pyridines(alkyl-BTPs) [3]. Par ailleurs, le contrôle et la détection de cations en milieu liquide radioactif ou non pourraient bénéficier de la mise en œuvre d'outils supplémentaires tels que les capteurs chimiques. Ils permettraient d'assurer un contrôle en temps réel des effluents liquides à la sortie des procédés de retraitement ou des déchets liquides entreposés sur les sites industriels.

Parmi la grande variété de systèmes de détection existants, la microbalance à quartz (QCM) a retenu notre attention. Dans le cas d'une détection en milieu liquide, l'utilisation d'une QCM nécessite la mise en œuvre d'une interface air-solution, la face en contact avec le liquide devant être préalablement recouverte d'un récepteur spécifique (molécule sensible/complexante) des ions à analyser. Notre objectif était donc de fonctionnaliser une



Figure 1. Immobilisation de l'amino-BTP sur la surface d'or de la microbalance à quartz.



bis-triazinyl-pyridine (BTP), pour l'immobiliser chimiquement sur un support solide dans le but d'élaborer une surface sensible (**figure 1**). La synthèse de cette BTP fonctionnalisée, son greffage sur support solide, la caractérisation de ce greffage et l'évaluation du pouvoir complexant du support sensible ainsi obtenu ont été réalisés.

Expériences et résultats

Un des piliers de cette étude repose sur la synthèse d'une BTP portant sur la pyridine centrale une chaîne aminoalkyle (chaine Y, **figure 1**). La molécule visée est la bis-tétraméthyltriazinyl-4-aminobutylpyridine. Le choix de cette BTP s'est fait non seulement sur des critères liés à son greffage, mais aussi en fonction des problèmes de stabilité de la BTP dans le milieu de détection (liquide acide potentiellement radioactif). Cette nouvelle amino-BTP est synthétisée en 5 étapes à partir d'un précurseur commercial [4].

Préalablement à l'immobilisation de l'amino-BTP, le substrat recouvert d'or est fonctionnalisé avec une chaîne carbonée longue (C_{11}) munie d'une fonction ester (bras espaceur). La fonction amine présente sur la BTP vient ensuite réagir sur les fonctions acides activées **Figure 2.** Réponse en variation de fréquence de la microbalance à quartz recouverte de BTP à deux solutions de cation néodyme Nd³⁺ ([a) 10⁻⁵ mol.L⁻¹ et (b) 10⁻³mol.L-1). Les phases 2 et 4 sont des phases d'exposition au cation et les phases 1, 3 et 5 sont des phases de non exposition.

préalablement et disposées sur le support en or (**figure 1**). L'analyse de surface par PM-IRRAS permet de caractériser et suivre pas à pas les différentes étapes du greffage par apparition ou disparition des bandes infrarouge caractéristiques des groupements greffés. Cette technique a permis de montrer que l'encombrement stérique de la BTP ne permet qu'un greffage partiel sur les fonctions acides activées présentes à la surface de la couche d'or.

La microbalance à quartz ainsi fonctionnalisée a été plongée dans des solutions aqueuses à pH acide (pH = 1) ou neutre (pH = 7) contenant deux types de cations lanthanide (Nd^{3+} et Eu^{3+}) et ce, à 3 concentrations différentes. La **figure 2** met en évidence la diminution de fréquence lors de l'exposition au cation ainsi que la réversibilité du système : retour de la fréquence à son niveau initial à l'arrêt de l'exposition.

Les analyses de surface par XPS confirment les résultats PM-IRRAS, et ont permis de discuter du mécanisme d'interaction entre BTP et cations.

Conclusion

L'immobilisation d'une BTP correctement fonctionnalisée sur une microbalance à quartz a permis de montrer qu'il était possible de concevoir la détection de cations lanthanide en solution aqueuse par QCM. Le comportement de la BTP vis-à-vis de deux cations (néodyme (Nd³⁺) et europium (Eu³⁺)) a également été étudié par XPS et PM-IRRAS à la surface de la microbalance et a montré que la BTP a une affinité plus marquée pour le néodyme que pour l'europium [4]. Cette étude permet d'envisager de nouveaux systèmes de détection pour l'environnement.

RÉFÉRENCES

[1] Z. KOLARIK, "Complexation and separation of lanthanides(III) and actinides(III) by heterocyclic N-donors in solutions", *Chem. Rev.*, **108**(10), p. 4208-4252 (2008).

[2] M. R. S. FOREMAN *et al.*, "Complexes formed between the quadridentate, heterocyclic molecules 6,6 '-bis-(5,6-dialkyl-1,2,4-triazin-3-yl)-2,2 '-bipyridine (BTBP) and lanthanides(III): implications for the partitioning of actinides(III) and lanthanides(III)", *Dalton Trans.*, **13**, p. 1645-1653 (2006).

[3] Z. KOLARIK et al., "Selective extraction of Am(III) over Eu(III) by 2,6-ditriazolyl- and 2,6-ditriazinylpyridines", *Solvent Extr. Ion Exch.*, **17**(1), p. 23-32 (1999).

[4] D. MERCIER et al., "Synthesis and grafting of a BTP derivative onto a quartz crystal microbalance for lanthanide detection", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**(23), p. 6099-6106 (2010).

.....

Développement d'un détecteur de vapeurs d'explosifs

La détection de substances chimiques gazeuses devient un élément incontournable de la sécurité des personnes, aussi bien du point de vue du contrôle de la pollution que de la prévention des actes terroristes. C'est une des raisons pour lesquelles divers groupes de recherche s'intéressent à la mise au point de capteurs chimiques de gaz. Ces dispositifs sont aisément miniaturisables et bénéficient de coûts de fabrication réduits. Leur fonctionnement est basé sur une interaction entre un matériau sensible et une phase gazeuse qui conduit à une modification de la physico-chimie du matériau. Une équipe du CEA a développé un matériau fluorescent capable de détecter de très faibles quantités d'explosifs sous forme de vapeurs. Cet article s'intéresse au matériau qui compose le système de détection et décrit ses performances.

T. Caron • S. Clavaguera • M. Guillemot • M. Bouhadid • F. Parret • F. Veignal • E. Pasquinet • P. Montméat • P. Prené • L. Hairault CEA - Le Ripault F. Perraut CEA - DRT-LETI, Grenoble

utilité de disposer de systèmes permettant de surveiller la concentration dans l'air de composés toxiques n'est plus à démontrer. De tels dispositifs basés sur des capteurs chimiques de gaz sont couramment utilisés dans l'industrie chimique et dans certains laboratoires. L'utilisation d'explosifs par des terroristes nécessite la mise au point de systèmes de détection de vapeurs sensibles et spécifiques. Il s'agit ici de détecter rapidement et

de façon fiable, la présence de substances pyrotechniques aussi bien dans les bagages ou les véhicules que sur des personnes. À l'heure actuelle, c'est le nez du chien qui constitue l'outil le plus performant. Toutefois, l'efficacité du chien est limitée dans le temps et nécessite un entraînement coûteux.

C'est pour l'ensemble de ces raisons que divers groupes de recherche axent leurs efforts sur l'élaboration de capteurs chimiques de vapeurs d'explosifs.



Figure 1. Démonstrateur portable.



Figure 2. Réponses du capteur à différents composés.

Matériau sensible et principe

Les matériaux organiques conjugués constituent une famille particulièrement intéressante pour la détection d'explosifs [1-3]. Nous nous intéressons ici à un matériau original de type phénylène-éthynylène fonctionnalisé par deux autres groupements de type imine [2]. Ce matériau permet de détecter des vapeurs de TNT (trinitrotoluène) ou de dérivés nitroaromatiques (dinitrotoluène DNT ou nitrotoluène NT). Le principe de fonctionnement repose sur l'extinction de fluorescence par transfert électronique : la mesure de l'intensité de fluorescence du composé renseigne sur la présence d'explosifs [2].

Dispositif de mesure

La mesure de la fluorescence d'un film mince du matériau est réalisée au moyen d'un démonstrateur portable mis au point par le CEA-LETI (**figure 1**, [4]). Dans ce dispositif, la lame de verre sur laquelle est déposé le matériau agit comme un guide d'onde et transmet la fluorescence de la chambre de détection au photomultiplicateur.

L'évaluation des performances du capteur consiste à placer le détecteur en présence de différentes vapeurs. Les conditions d'essais que nous avons choisies sont représentatives de l'utilisation d'un détecteur d'explosif destiné à confirmer la présence d'explosifs sur des colis abandonnés ou sur des personnes suspectes. Deux types d'expériences ont été conduits :

- > dans des atmosphères réelles enrichies en vapeurs d'explosifs: de 5 à 100 ppbv diluées dans l'air humide (1 ppbv = 1 partie par milliard volumique = 1µL dilué dans 1 m³);
- > sur des tissus imprégnés de traces d'explosifs: de 5 à 50 mg répartis sur 15 cm².

Performances

Comme le montre la **figure 2**, la présence de dinitrotoluène ou de trinitrotoluène conduit à une très nette diminution de la fluorescence du matériau [5]. Pour une exposition de 10 minutes sous

TNT, l'extinction de fluorescence atteint 35%. Le dispositif est bien sensible aux vapeurs de composés nitroaromatiques.

Afin d'évaluer le caractère sélectif de la réponse, le détecteur a été exposé à diverses vapeurs représentatives d'une atmosphère réelle (solvants, parfums, détergents...). Si certaines vapeurs comme les cétones peuvent perturber le signal du capteur, aucun composé ne se caractérise par un effet net et reproductible. Le système proposé est donc robuste aux variations de composition que l'on peut rencontrer dans une atmosphère réelle et devrait présenter un taux de fausses alarmes particulièrement faible.

Les expériences menées sur des tissus souillés d'explosifs ont également conduit à des détections non équivoques. On atteint une inhibition de fluorescence de 15% si le détecteur est exposé à un tissu sur lequel ont été dispersés 5 mg de TNT. Cela constitue un niveau de sensibilité remarquable et démontre que notre système de détection est bien adapté au contrôle ponctuel de colis ou de personnes.

RÉFÉRENCES

[1] R. DEANS, Detection of peroxides and explosives, Patent WO 2008/073173 A2 (2008).

[2] S. CLAVAGUERA, Conception, synthèse et caractérisation de matériaux fluorescents pour l'élaboration d'un capteur chimique d'explosifs, Thèse de l'Université de Montpellier (2007).

[3] S. CLAVAGUERA et al., "Comparison of fluorescence and QCM technologies: Example of explosives detection with a pi-conjugated thin film", *Talanta*, 82, p. 1397-1402 (2010).

[4] E. SCHULTZ et al., "A novel fluorescence-based array biosensor: Principle and application to DNA hybridization assays", *Biosensors and Bioelectronics*, 23(7), p. 987-994 (2008).

[5] T. CARON et al., "Ultra trace detection of explosives in air: Development of a portable fluorescent detector", *Talanta*, **81**, p. 543-548 (2010).

Prix Science et Défense 2010

→ Le jury du prix « Science et défense », présidé par le Professeur Pierre-Louis Lions, a distingué **Michel Mandallena** et **Bruno Stupfel** du Cesta pour leurs travaux portant sur la « Simulation haute performance de phénomènes de propagation d'ondes ». Partagée avec les équipes d'Astrium Space Transportation et d'EADS Innovation Work, cette distinction reconnaît le très haut niveau de compétences de l'ensemble des équipes du Cesta concernées par le domaine des ondes électromagnétiques.

«Physics highlights» de la revue Physical Review Letters

→ La revue Physical Review Letters a distingué l'article de Dewaele et al. intitulé « High Melting Points of Tantalum in a Laser-Heated Diamond Anvil Cell » publié en juin 2010. Parmi les auteurs, figurent Agnès Dewaele et Paul Loubeyre du Département de physique théorique et appliquée (DPTA) du centre DAM - Île de France (DIF). Ce travail a été sélectionné par les éditeurs de Physical Review Letters pour être portés à la connaissance des autres communautés de physiciens, et a, à ce titre, bénéficié d'une mise en valeur par un « Point de vue ». Ces travaux, conduits sur la ligne de lumière ID27 de l'ESRF, ont en effet mis fin à la controverse liée à la détermination de la courbe de fusion du tantale à très haute pression.

Prix de l'European Physical Society

→ Chaque année, la division « Physique des plasmas » de l'EPS attribue ses « PhD Research Awards » aux meilleurs travaux de thèse du domaine. Pour l'année 2010, deux anciens doctorants du Département de physique théorique et appliquée (DPTA) du centre DAM - Île de France (DIF) et un du Laboratoire pour L'utilisation des lasers intenses (LULI) co-encadré par DIF/DPTA, ont été récompensés.

Émeric Falize et Bérénice Loupias sont distingués pour leurs travaux en astrophysique de laboratoire, le premier s'étant intéressé à l'aspect théorique du problème et la seconde à son volet expérimental. Xavier Davoine est récompensé pour ses travaux sur le thème des accélérateurs laser-plasma.

Prix du meilleur poster

→ Ce prix a été décerné à Janick Bigarre du centre du Ripault lors du congrès « Progress in MEA Components for Medium and High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells » (2nd Carisma International Conference) qui s'est tenu à la Grande Motte du 19 au 22 septembre. Ce poster a présenté les propriétés de la membrane hybride PVDF/silice sulfonnée développée dans le cadre du projet ANR Menhyr ainsi que le changement d'échelle prévu pour le projet Ademe Menhate.

SOUTENANCE EN HDR EN 2010

Habilitations à diriger des recherches

Sylvain Girard

CEA - DAM Île de France

« Propriétés des défauts ponctuels à l'origine de la dégradation des fibres optiques et verres à base de Silice en environnement radiatif. »

Jérôme Neauport CEA-CESTA

« Procédés de fabrication optique pour composants lasers de puissance. »

Stéphanie Thiébaut

CEA - Valduc « Stockage des isotopes de l'hydrogène - Étude du vieillissement des tritiures métalliques.»

Prix du meilleur papier étudiant

→ Ce prix a été attribué à Vanessa Cardinali, doctorante au Département lasers de puissance (DLP) du Cesta, lors de la session « Solid State Lasers and Amplifiers », pour son article «Thermo-Optical Measurements of Ytterbium Doped Sesquioxides Ceramics » lors du congrès SPIE Photonics Europe (Bruxelles, avril 2010). L'article présente ses travaux, réalisés avec E. Marmois, B. Le Garrec et G. Bourdet, sur les performances lasers et sur la mesure des coefficients thermo-optiques de céramiques sesquioxydes dopées utterbium à basse température.



La chimie au CEA/DAM



PROCHAINEMENT

Dans le cadre de l'année internationale de la chimie, la rédaction édite un recueil consacré à **la chimie** à la Direction des applications militaires du CEA.

Pour commander ce recueil, s'adresser par courrier électronique à : chocs@cea.fr



energie atomique • energies alternatives

Direction des applications militaires www-dam.cea.fr