The background features several overlapping wireframe spheres in shades of green and blue. Interspersed among these spheres are several small, faceted spheres in yellow and blue. The overall aesthetic is futuristic and scientific.

chocs avancées 2012

Avancées scientifiques et techniques de la direction des applications militaires

DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

cea

SOMMAIRE

ÉDITORIAL

02 T. MASSARD

INTERACTION LASER-MATIÈRE

04 **Évaluation de la conductivité thermique de la silice à haute température**

P. COMBIS, P. CORMONT, L. GALLAIS, D. HÉBERT, L. ROBIN, J.-L. RULLIER

06 **Simulations sur processeurs graphiques d'impulsions laser nanosecondes**

L. BERGÉ, G. COLIN DE VERDIÈRE, S. MAUGER, S. SKUPIN

PHYSIQUE DES PLASMAS & ÉLECTROMAGNÉTISME

08 **Expériences d'instabilité Rayleigh-Taylor ablative en régime fortement non linéaire sur le National Ignition Facility**

A. CASNER, L. MASSE, S. LIBERATORE, B. DELORME, L. JACQUET, P. LOISEAU, V. A. SMALYUK, D. MARTINEZ, B. A. REMINGTON

10 **Description statistique des structures Zeeman dans les plasmas chauds**

J.-C. PAIN, F. GILLERON

12 **Évaluation des flux d'électrons dans la magnétosphère**

D. MOURENAS, J.-F. RIPOLL

PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE

14 **Simulation de l'éjection de matière sous choc par dynamique moléculaire**

O. DURAND, L. SOULARD

16 **Fluctuations quantiques des noyaux et structures de l'hydrogène solide sous très hautes pressions : une compréhension par la simulation**

G. GENESTE, F. BOTTIN, M. TORRENT, P. LOUBEYRE

PHYSIQUE NUCLÉAIRE

18 **Le noyau atomique : du liquide quantique à la molécule**

J.-P. EBRAN, E. KHAN, T. NIKŠIĆ, D. VRETENAR

20 **L'état isomère du ⁴³S est-il sphérique ?**

J.-M. DAUGAS, L. GAUDEFROY, R. CHEVRIER

ENVIRONNEMENT

22 **Accident de la centrale nucléaire de Fukushima Dai-ichi : analyse des rejets de radionucléides dans l'atmosphère**

G. LE PETIT, P. ACHIM, G. DOUYSSSET, P. GROSS, M. MONFORT, C. MOULIN

INSTRUMENTATION & MÉTROLOGIE

24 **Analyse du phénomène de striction en régime dynamique par stéréocorrélation**

G. BESNARD, J.-M. LAGRANGE, P. MARTINUZZI, F. HILD, S. ROUX

26 **Suivi submillimétrique de réflecteurs radar**

G. QUIN, PH. LOREAU

28 **Caractérisation du spectre en neutrons du réacteur Caliban par dosimétrie à activation**

X. JACQUET, P. CASOLI, N. AUTHIER, G. ROUSSEAU, C. BARSU

SCIENCE DES MATÉRIAUX

30 **Interaction élastique de nanoparticules**

X. DIEUDONNÉ, H. PIOMBINI, K. VALLÉ, P. BELLEVILLE, A. AYOUC, G. VAUDEL, V. GUSEV, P. RUELLO

32 **Chimie et électrochimie d'une interface cathode/électrolyte d'un accumulateur au lithium-ion**

J. DEMEAUX, H. GALIANO, B. CLAUDE-MONTIGNY, M. CAILLON-CARAVANIER, D. LEMORDANT

34 **Vers une description atomistique de la décomposition des matériaux**

D. MATHIEU

36 **Propriétés de couches magnétiques à anisotropie en hélice**

M. GLOANEC, S. DUBOURG, F. DUVERGER, D. PLESSIS, A. BONNEAU-BRAULT

38 **Fragmentation de céramiques de blindage**

B. ERZAR, J.-L. ZINSZNER, E. BUZAUD, P. FORQUIN

CALCUL NUMÉRIQUE

40 **Une méthode eulérienne directe pour la simulation des écoulements compressibles multi-matériaux avec glissement**

R. MOTTE, J.-P. BRAEUNIG, M. PEYBERNES

42 **Partitionnement et maillage quadrangulaire structuré par blocs pour des géométries multi-domaines**

N. KOWALSKI, F. LEDOUX, P. FREY

44 **Un nouveau type de schéma lagrangien pour les écoulements élastoplastiques**

P.-H. MAIRE, R. ABGRALL, J. BREIL, R. LOUBÈRE, B. REBOURCET

46 **Modélisation des explosions avec postcombustion**

E. LAPÉBIE, L. MUNIER, R. SAUREL, G. HUBER, G. JOURDAN

PRIX ET DISTINCTIONS, LIVRES PARUS, HDR



Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives

Chocs Avancées 2012, Avancées scientifiques et techniques de la Direction des applications militaires.

Image de couverture: Simulation d'un plasma détendu de silice SiO₂ à 10 000K (silicium : jaune, oxygène : bleu) – ©/CEA/DAM

Directeur de la publication: Thierry MASSARD. **Coordinateur scientifique**: Gilles DAMAMME.

Comité scientifique: Philippe BELLEVILLE, Daniel BOUCHE, Pierre BRUGUIÈRE, Jacques CAGNOUX, Catherine CHERFILS, Jean-François CLOUET, Gilles DAMAMME, Philippe DUVIGNAC, Francis HARDOUIN, Denis JURASZEK, Christophe LELOUP, Paul LOUBEYRE, Stéphane LOUBIÈRE, Daniel MALYS, Christophe MOULIN, Bruno SCHEURER, Philippe SIMONETTI.

Rédacteur en chef: Michel BOIVINEAU.

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

Chocs Avancées

CEA/DAM

Institut supérieur des études nucléaires de défense (ISENDé)

Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon cedex

Tél: 33 (0)1 69 26 76 98 - Fax: 33 (0)1 69 26 70 80

E-mail: chocs@cea.fr

Brochure imprimée sur papier écogéré
ISSN 1961-7399

ÉDITORIAL



THIERRY MASSARD
 Directeur scientifique
 de la Direction des applications militaires du CEA

Vous avez dit Simulation ?

Lorsque le CEA/DAM a conceptualisé à partir de 1995 le programme Simulation pour garantir la sécurité et la fiabilité des armes de la dissuasion française, qui aurait prédit que simulation s'écrirait près de vingt ans plus tard comme un nom commun pour décrire un courant profond qui bouleverse autant la façon de concevoir et développer des produits nouveaux, que les outils informatiques eux-mêmes développés pour réaliser cette révolution du XXI^e siècle ?

Mais que se cache-t-il derrière ce vocable ? C'est avant tout une façon d'allier une connaissance approfondie de la physique des phénomènes à des capacités quasi illimitées de calcul et de visualisation. Les outils de conception ainsi créés sont tellement efficaces qu'ils garantissent les performances des produits avec un recours de plus en plus réduit aux essais.

La simulation numérique nécessite le développement d'infrastructures informatiques complexes, mais aussi la maîtrise du calcul haute performance et du calcul massivement parallèle, car les modèles sont extraordinairement gourmands en ressources informatiques. Les plus grands calculateurs français comme Curie ou Tera 100 disposent maintenant d'architectures hybrides (CPU et GPU) permettant de coupler le calcul parallèle et le calcul vectoriel. Ces infrastructures de pointe ouvrent également la voie au *Cloud Computing* permettant de délocaliser et

de partager à la fois les outils de la simulation et les données, par milliards d'octets, issues de ces simulations. *Cloud Computing* et *Big Data* sont les clés pour la compétitivité accrue des industriels qui sauront les utiliser dans leurs développements.

Approfondir tous les concepts qui sous-tendent cette démarche, les rendre accessibles à la communauté scientifique et industrielle sont autant d'efforts prioritaires de la France auxquels le CEA participe à travers les structures mises en place avec l'industrie, avec la communauté scientifique et académique. Il faut, non seulement développer les technologies, mener une recherche de base solide, mais aussi former des femmes et des hommes au meilleur niveau. Le CEA/DAM s'investit dans ces trois domaines – technologie, science de base, éducation et formation – pour réaliser ses programmes et en faire bénéficier l'industrie française, aussi bien les grands groupes que les petites et moyennes entreprises.

Il n'y a pas de simulation sans progrès dans la compréhension de la physique. Expérimentations et modélisations gardent tout leur sens dans le monde de la simulation. L'expérience numérique est un rêve qui devient maintenant réalité. Elle vient dorénavant en support des expérimentations qui sont, par nature, nécessaires mais coûteuses. Elle révolutionne l'approche du chercheur, elle ouvre des champs d'investigation nouveaux, repoussant les murs du

Supercalculateur Curie

Le supercalculateur Curie, financé par Genci (Grand équipement national du calcul intensif), est exploité par le CEA dans son Très grand centre de calcul (TGCC) à Bruyères-le-Châtel. Il offre aux chercheurs européens une très large palette d'applications dans tous les domaines scientifiques, qu'il s'agisse des plasmas et des hautes énergies, de la chimie et des nanotechnologies, de l'énergie et du développement durable...

Ce supercalculateur d'une puissance de 2 pétaflops (2 millions de milliards d'opérations par seconde) est l'une des dix machines les plus puissantes au monde.

© Cadam/CEA



laboratoire bien au-delà des frontières géographiques mais aussi des frontières de la connaissance. L'expérience numérique oblige cependant à modifier profondément la vision du résultat et l'approche des incertitudes associées. L'erreur de mesure est remplacée par l'erreur liée aux modèles et par les incertitudes sur les données d'entrée. Les barres d'erreurs existent encore mais sont d'une autre nature. Savoir porter un regard critique, savoir maîtriser les incertitudes pour les réduire, est là aussi un challenge qu'il faut relever.

Avancées 2012 illustre parfaitement cette démarche. Les efforts pour mieux comprendre les phénomènes aux échelles les plus élémentaires et les efforts pour introduire ces observations dans des modèles les plus physiques possibles s'affranchissant de toute hypothèse empirique, sont présents dans toutes les publications du CEA/DAM. Bien sûr *Avancées 2012* n'a pas la prétention de présenter de façon exhaustive la démarche de simulation, ni même

de refléter la totalité de la production scientifique du CEA/DAM, mais nous souhaitons que cet échantillonnage parmi nos meilleures publications de l'année 2012 fasse mieux connaître comment recherche de base et recherche technologique se combinent dans cette audacieuse démarche qu'est la simulation numérique. De la physique des plasmas à la physique nucléaire, de la dynamique moléculaire des matériaux à la chimie de l'environnement, de l'élastoplasticité des matériaux à l'hydrodynamique compressible, ce numéro balaye des domaines très différents mais où, chacune dans leur discipline, des avancées importantes sont réalisées.

Je souhaite que le lecteur porte ce regard un peu différent sur *Avancées 2012*. Oui, le CEA/DAM progresse toujours dans le domaine de la simulation, et ce grand mouvement est le produit d'un effort collectif de nos chercheurs dans de nombreuses disciplines. Bonne lecture !

Évaluation de la conductivité thermique de la silice à haute température

P. COMBIS / CEA–DAM Île-de-France

P. CORMONT - D. HÉBERT - L. ROBIN - J.-L. RULLIER / CEA – Cesta

L. GALLAIS / Institut Fresnel, UMR 6133 CNRS - Université Aix-Marseille - École centrale Marseille

Les grandes optiques en silice des lasers de puissance présentent inévitablement quelques défauts de surface dès leur fabrication et après utilisation. Irradier la silice avec un laser CO₂ à la longueur d'onde de 10,6 μm, pour laquelle la silice est fortement absorbante, permet un recuit capable de réparer ces dommages. Nous avons ainsi développé un code permettant de modéliser la transformation d'une surface en silice illuminée par un laser CO₂. Les paramètres physiques de la silice sont connus entre 300 K et 2000 K, excepté la conductivité thermique. Pour l'évaluer, la température surfacique d'un échantillon de silice a été mesurée par thermographie infrarouge et comparée à des simulations qui permettent, par approches successives, de déterminer une valeur correcte de cette conductivité.

Dans le cadre des études sur la résistance à l'endommagement des optiques en silice du Laser Mégajoule (LMJ), nous travaillons sur la réparation des défauts de surface par fusion au moyen d'un laser CO₂. Un exemple de ce procédé est illustré sur la **figure 1**. Le dommage, généré par l'impulsion d'un laser de puissance, présente une fracturation sous-surfacique importante qui va croître sous l'effet des impulsions suivantes. Par contre, la transformation de ce même site après chauffage par une ou deux irradiations au laser CO₂, le rend résistant aux intensités lumineuses atteintes sur les lasers de puissance tels que le LMJ [1] ou le NIF.

Dans le but de modéliser l'interaction du laser CO₂ avec la surface de l'optique en silice et d'inter-

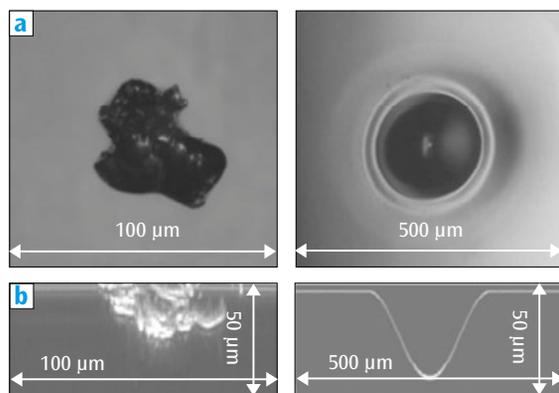


Figure 1. Réparation d'un dommage par laser CO₂. (a) : vue de dessus au microscope optique classique - (b) : vue transverse sous la surface (microscopie confocale).

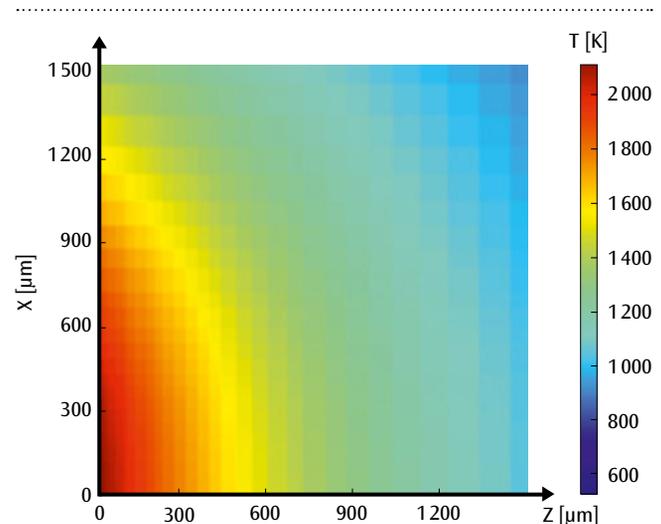


Figure 2. Cartographie 3D (profondeur suivant z, position radiale suivant x) de la température (en K) à la fin de l'impulsion laser (t = 1 s).

préter les expériences réalisées avec ce laser, nous avons développé un code 2D, axi-symétrique (code BERENICE). Dans ce code, la cible en verre est décrite avec quelques milliers de mailles quadrangulaires dont la dimension caractéristique vaut 10 μm au niveau du foyer du laser pour atteindre 200 μm loin de la zone de dépôt. Ce dépôt d'énergie par laser est modélisé au moyen d'une centaine de rayons tels que la composition des énergies de chaque rayon permet de restituer le profil spatial gaussien de la tâche laser au niveau de la surface irradiée. La diffusion de l'énergie apportée par le laser dans l'ensemble de la cible

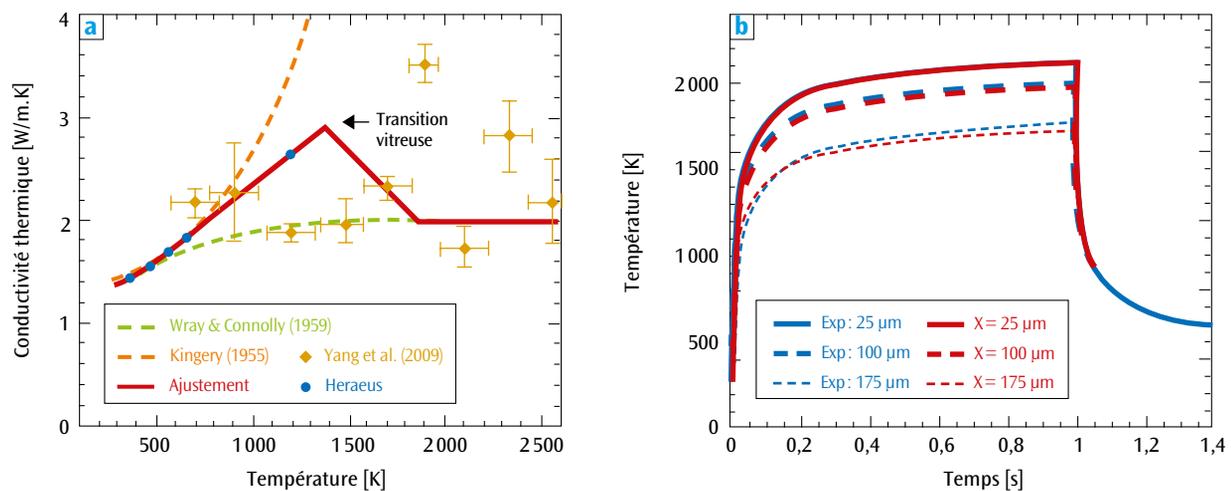


Figure 3. (a) : Comparaison des différentes valeurs de la conductivité thermique – (b) : Comparaison expérience-théorie des profils temporels de température pour une irradiation de 1 s à 5,3 W sur un diamètre de 700 μm.

est modélisée par la résolution numérique de l'équation de la chaleur. Pour affiner les simulations, nous modélisons aussi la perte d'énergie due à l'émission radiative au niveau de la surface air-verre. À titre d'exemple, nous présentons, sur la [figure 2](#), une cartographie de la température d'une cible de silice irradiée à puissance constante (5,3 W) avec une tâche laser de diamètre 700 μm.

Dans nos expériences et nos simulations, la densité de la silice varie assez peu autour de sa valeur standard (2,2 g/cm³) puisque la température n'excède pas 2100 K. D'autre part, les pressions induites restent très proches de la pression atmosphérique initiale. Il n'est donc pas nécessaire de modéliser le mouvement de la matière. Les données physiques nécessaires à la modélisation sont finalement assez limitées : l'indice optique complexe à 10,6 μm en fonction de la température à densité standard fourni par Mac Lachlan [2], la capacité calorifique à pression constante (1 atm) en fonction de la température, fournie par les tables NIST-JANAF et, enfin, la conductivité thermique à densité standard pour des températures variant entre 300 K et 2500 K. Pour cette dernière, nous disposons, d'une part, des valeurs fournies par le fabricant (Heraeus) pour des températures inférieures à 1200 K et, d'autre part, de différentes séries de valeurs trouvées dans la littérature [3] représentées sur la [figure 3a](#).

Nous avons mesuré, par thermographie infrarouge [4], la variation spatio-temporelle du profil de température sous irradiation par laser CO₂. La restitution correcte par les simulations de ces profils temporels expérimentaux de température à différentes distances du centre de la tâche focale ([figure 3b](#)),

nous a imposé une loi de variation de la conductivité thermique présentant une décroissance à partir de 1400 K (transition vitreuse) puis une stabilisation vers 1900 K. Ce comportement, signalé dans une publication récente [5], n'avait encore jamais été observé.

Ainsi, une approche itérative originale, associant des mesures expérimentales et des simulations numériques, nous a permis de déterminer la variation de la conductivité thermique de la silice dans un domaine de température (1200–2000 K) où elle était mal connue.

Références

- [1] P. CORMONT, L. GALLAIS, L. LAMAIGNERE, J.-L. RULLIER, P. COMBIS, D. HEBERT, "Impact of two CO₂ laser heatings for damage repairing on fused silica surface", *Opt. Exp.*, **18**, 26068 (2010).
- [2] A.D. Mc LACHLAN, F. P. MEYER, "Temperature dependence for the extinction coefficient of fused silica for CO₂ laser wavelengths", *Appl. Opt.*, **26**, p. 1728-1731 (1987).
- [3] S. T. YANG, M. J. MATTHEWS, S. ELHADJ, V. G. DRAGGOO, S. E. BISSON, "Thermal transport in CO₂ laser irradiated fused silica : In situ measurements and analysis", *J. Appl. Phys.*, **106**, 103106 (2009).
- [4] L. ROBIN, P. COMBIS, P. CORMONT, L. GALLAIS, D. HEBERT, C. MAINFRAY, J.-L. RULLIER, "Infrared thermometry and interferential microscopy for analysis of crater formation at the surface of fused silica Under CO₂ laser irradiation", *J. Appl. Phys.*, **111**, 063106 (2012).
- [5] P. COMBIS, P. CORMONT, L. GALLAIS, D. HEBERT, L. ROBIN, J.-L. RULLIER, "Evaluation of the fused silica thermal conductivity by comparing infrared thermometry measurements with two-dimensional simulations", *Appl. Phys. Lett.*, **101**, 211908 (2012).

Simulations sur processeurs graphiques d'impulsions laser nanosecondes

L. BERGÉ - G. COLIN DE VERDIÈRE - S. MAUGER / CEA-DAM Île-de-France
S. SKUPIN / Institut Max Planck, Dresden & Université Friedrich-Schiller, Jena, Allemagne

Les processus d'auto-focalisation et de rétrodiffusion Brillouin sont responsables de dommages dans les optiques des lasers de puissance comme le Laser Mégajoule (LMJ). La compréhension et la maîtrise de ces processus nécessitent des codes numériques 3D dont les calculs sont maintenant accélérés par des processeurs graphiques.

Le LMJ doit délivrer des impulsions nanosecondes dont la puissance excède le térawatt ($1 \text{ TW} = 10^{12} \text{ W}$). En traversant les hublots de la chambre d'expérience, ces impulsions peuvent générer des phénomènes singuliers, comme l'auto-focalisation optique qui produit des cellules de lumière micrométriques de très forte intensité appelées « filaments ». Cette dynamique force l'onde laser incidente (onde de pompe) à croître en intensité sur plusieurs ordres de grandeur et à se fragmenter en temps en structures extrêmement piquées, dont la durée peut être réduite à quelques centaines de femtosecondes ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$). Cette filamentation conduit à l'endommagement des verres de silice. En outre, la pression exercée au sein du matériau produit des ondes acoustiques sur lesquelles diffuse une partie de l'énergie laser par diffusion Brillouin stimulée. Une seconde onde électromagnétique (onde Stokes) est alors créée, se propage en direction opposée à celle de l'onde de pompe [1] et est source de dommages en face avant du hublot.

L'algorithme décrivant ces dynamiques singulières est un code parallèle appelé « SBS_3D ».

À partir de données d'entrée (longueur totale de propagation, forme de l'impulsion), le code intègre deux équations de type Schrödinger non linéaires, l'une pour la composante avant de l'onde laser, l'autre pour sa composante rétrodiffusée, couplées à une troisième équation décrivant l'émission d'ondes acoustiques. Typiquement, une résolution spatiale de l'ordre du micron et un pas en temps proche de 10 fs sont requis pour résoudre correctement l'auto-focalisation. Pour des impulsions de quelques nanosecondes, le maillage usuel est en général $256 \times 256 \times 4096$ dans l'espace (x, y, z) pour des calculs parallèles exploitant sur 4 jours 128 processeurs CPU (Central Processing Unit). Ceci correspond à des pas en espace de $4 \mu\text{m}$ et un incrément en temps de 60 fs.

La figure 1a illustre la propagation des deux ondes laser et Stokes dans 5 cm de silice dans ces conditions. La courbe bleue représente l'intensité maximale d'une onde de pompe modulée en phase; la courbe verte illustre celle de l'onde Stokes rétrodiffusée. Ces intensités croissent du $\text{GW}\cdot\text{cm}^{-2}$ à plusieurs $\text{TW}\cdot\text{cm}^{-2}$ sur quelques mm [2]. Ici le maillage limite la croissance de l'onde de pompe,

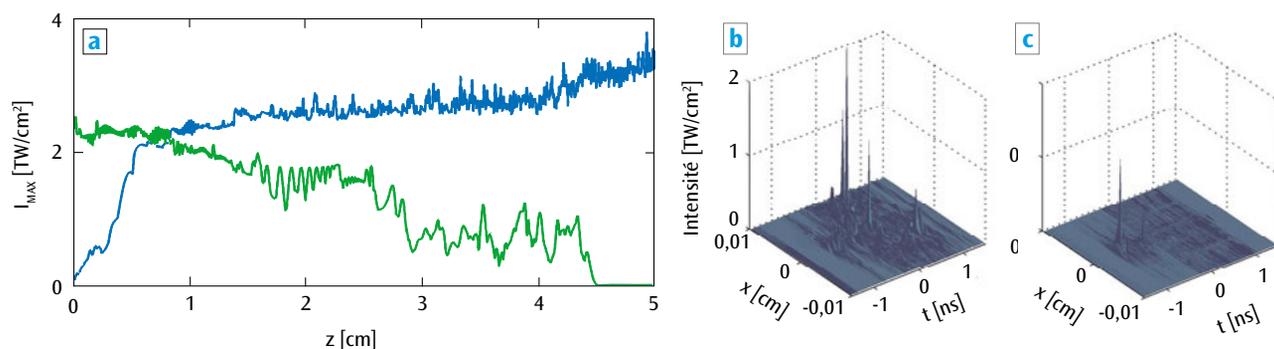


Figure 1. (a) : Intensité maximale d'une impulsion laser de 2,5 ns modulée en phase opérant à 355 nm dans 5 cm de silice et celle de son onde Stokes. La courbe bleue représente l'onde de pompe; la courbe verte illustre l'onde Stokes rétrodiffusée. Profils d'intensité dans le plan (x, t) à la distance $z = 2,34 \text{ cm}$ pour l'onde de pompe laser (b) et l'onde Stokes (c).

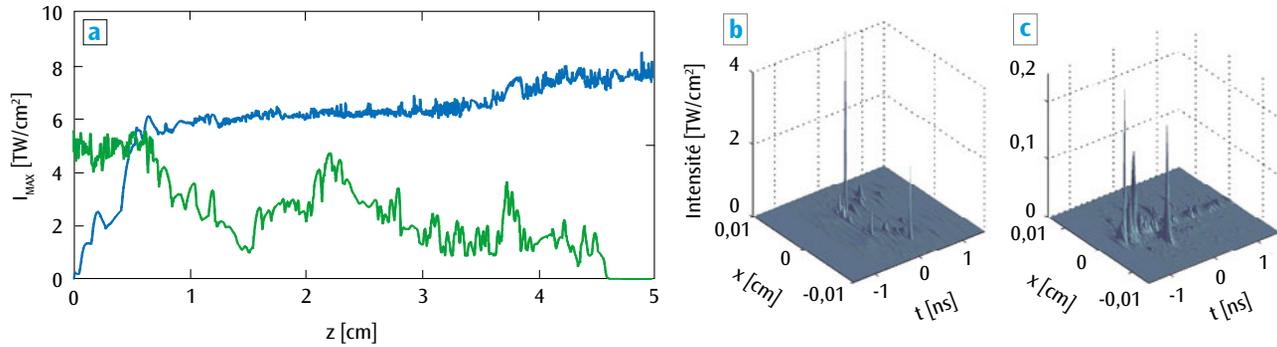


Figure 2. (a) : Calcul GPU pour l'onde de pompe (courbe bleue) et l'onde Stokes (courbe verte) produites par l'impulsion nanoseconde simulée en figure 1. Profils d'intensité dans le plan (x,t) de l'onde de pompe (b) et de l'onde Stokes (c) à $z = 2,34$ cm. La résolution graphique est limitée à 9 ps.

avant que la production d'un plasma puisse apparaître à des intensités laser approchant $7 \text{ TW} \cdot \text{cm}^{-2}$. Les figures 1b et 1c montrent des filaments grossièrement résolus avec le maillage précédent. Améliorer ces résultats nécessite de doubler le nombre de points en (x, y, z, t) , ce qui revient à multiplier par 16 le nombre de CPU pour achever le même calcul en des temps comparables. Une alternative est alors d'exploiter les processeurs graphiques GPU (*Graphics Processing Unit*) pour accélérer le code.

Le code SBS_3D/CUDA

Un GPU est constitué d'un grand nombre d'unités de traitement qui travaillent en parallèle. Pour l'utiliser de manière optimale, un code doit favoriser des traitements intensifs et limiter les transferts de données avec les CPU. Le code SBS_3D a donc été réécrit pour exploiter la pleine puissance des cartes graphiques.

Nous avons adapté le code SBS_3D/CPU à l'architecture CUDA (*Computer Unified Device Architecture*), de sorte que seuls des transferts de données imposés par la décomposition en domaines soient nécessaires. Pour évaluer les performances du code GPU, deux types de tests ont été effectués : l'un de «strong scaling» (décroissance du temps de traitement à nombre d'unités de traitement croissant pour un problème de taille donnée), l'autre de «weak scaling» (préservation du temps de traitement pour un problème de taille croissant avec le nombre d'unités de traitement). Ces tests ont été réalisés sur la partition hybride de la machine Titane du CCRT (Centre de calcul de recherche et technologie). En configuration «strong scaling», le code CUDA présente un facteur d'accélération proche de 10. En configuration «weak scaling», les facteurs d'accélération restent excellents : de 12,4 à 9,6. De meilleurs gains sont obtenus pour des maillages lourds impliquant une exploitation optimale de la mémoire GPU.

Amélioration des résultats physiques

Nous avons finalement utilisé 128 processeurs graphiques de la machine Titane, afin d'améliorer les résultats précédents. L'impulsion laser commentée en figure 1 a été de nouveau simulée en doublant la résolution dans toutes les dimensions avec $512 \times 512 \times 8192$ points. Les résultats de calcul ont été obtenus sur 4 jours, soit le temps requis pour une simulation CPU avec une résolution 16 fois plus faible. Ces résultats sont résumés sur la figure 2. Par comparaison avec la figure 1, on observe que le calcul sur GPU permet de repousser le seuil de saturation imposé artificiellement par le maillage à des valeurs d'intensité supérieures à $7 \text{ TW} \cdot \text{cm}^{-2}$, pour lesquelles une ionisation du milieu peut physiquement apparaître. Les profils des figures 2b et 2c montrent que la distribution des filaments change avec la résolution : plus élevée, celle-ci améliore la physique décrite.

En conclusion, nous avons adapté un code numérique parallèle aux processeurs graphiques en employant une architecture CUDA. L'utilisation des GPU promet des facteurs d'accélération supérieurs à 10, permettant de réaliser des simulations avec des maillages 16 fois plus importants en des temps d'exécution comparables.

Références

- [1] R. W. BOYD, *Nonlinear Optics*, Academic Press, San Diego (1992).
- [2] S. MAUGER, L. BERGÉ, S. SKUPIN, "Controlling the stimulated Brillouin scattering of self-focusing nanosecond laser pulses in silica glasses", *Phys. Rev. A*, **83**, 063829 (2011).
- [3] S. MAUGER, G. COLIN DE VERDIÈRE, L. BERGÉ, S. SKUPIN, "GPU accelerated fully space and time resolved numerical simulations of self-focusing laser beams in SBS-active media", *J. Comput. Phys.*, **235**, p. 606-625 (2013), <http://dx.doi.org/10.1016/j.jcp.2012.10.034>.

Expériences d'instabilité Rayleigh-Taylor ablative en régime fortement non linéaire sur le National Ignition Facility

A. CASNER - L. MASSE - S. LIBERATORE - B. DELORME - L. JACQUET - P. LOISEAU / CEA-DAM Île-de-France

V. A. SMALYUK - D. MARTINEZ - B. A. REMINGTON / Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, Californie, USA

La maîtrise du développement des instabilités hydrodynamiques de type Rayleigh-Taylor est cruciale pour la réalisation d'implosions performantes sur le Laser Mégajoule (LMJ). En présence d'un front d'ablation, la complexité de ces instabilités nécessite une validation expérimentale des modèles théoriques et des simulations numériques associées. Une proposition d'expériences à visée académique a été acceptée fin 2010 afin d'étudier sur le National Ignition Facility (NIF) le régime fortement non linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor (IRT) ablative. Elle devrait permettre d'atteindre pour la première fois en attaque indirecte un régime de compétition entre bulles. Le premier tir de cette proposition vient d'avoir lieu.

Les récentes expériences de la campagne d'ignition sur le NIF [1] ont démontré que le contrôle du développement de défauts lors de l'implosion d'une capsule de combustible est primordial pour obtenir des performances neutroniques élevées et l'ignition dans les expériences de fusion par confinement inertiel (FCI). Dans le cadre du premier appel à projet pour des expériences académiques sur le NIF, une proposition d'expériences issue du CEA/DAM, a été retenue en 2010 par un comité de sélection d'universitaires américains. L'originalité de la proposition découle de la volonté d'étudier le stade fortement non linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Taylor (celle-ci

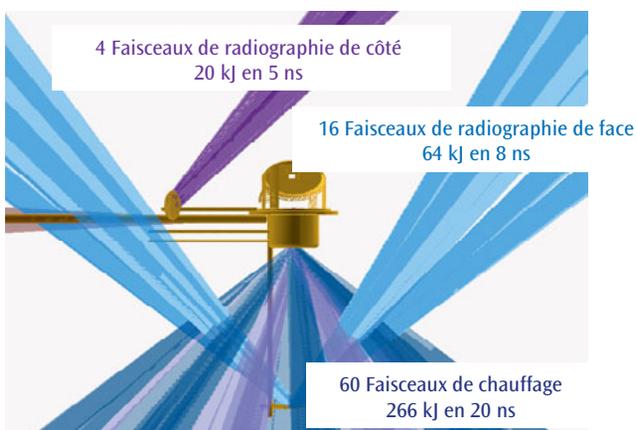


Figure 1. Schéma de principe de l'expérience : la demi-cavité est chauffée par 60 faisceaux à 44,5° et 50° du bas de la chambre NIF, et radiographiée de face vers un diagnostic situé au pôle nord de la chambre. Une radiographie de côté permet de mesurer la trajectoire de l'échantillon accéléré.

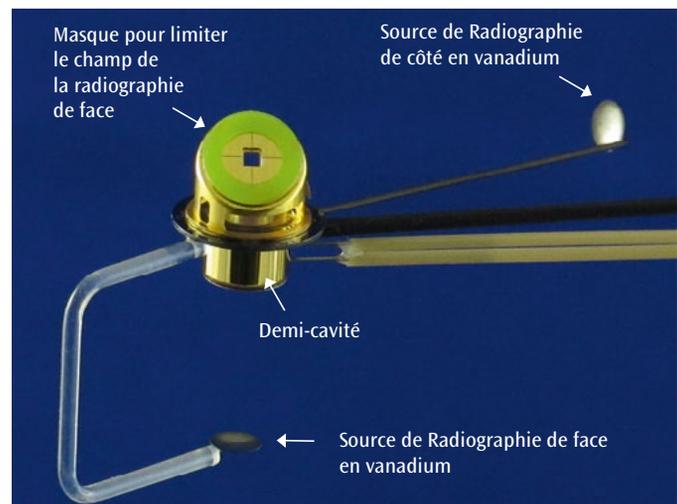


Figure 2. Photographie de la première cible assemblée et tirée le 21 mars 2013.

apparaît à l'interface entre deux fluides de densités différentes quand ils sont sujets à une accélération inertielle dirigée du matériau le plus léger vers le plus lourd) ablative en attaque indirecte, tout comme en attaque directe [2]. En effet, même si la caractérisation expérimentale de l'IRT ablative a été un sujet d'études depuis 15 ans, la durée limitée de la phase d'accélération accessible sur les lasers tels que Nova et Omega (au maximum 5 ns) ne permet pas d'atteindre un régime fortement non linéaire. En disposant d'une source laser tel que le NIF, nous pouvons accéder pour la première fois en attaque indirecte à un régime de

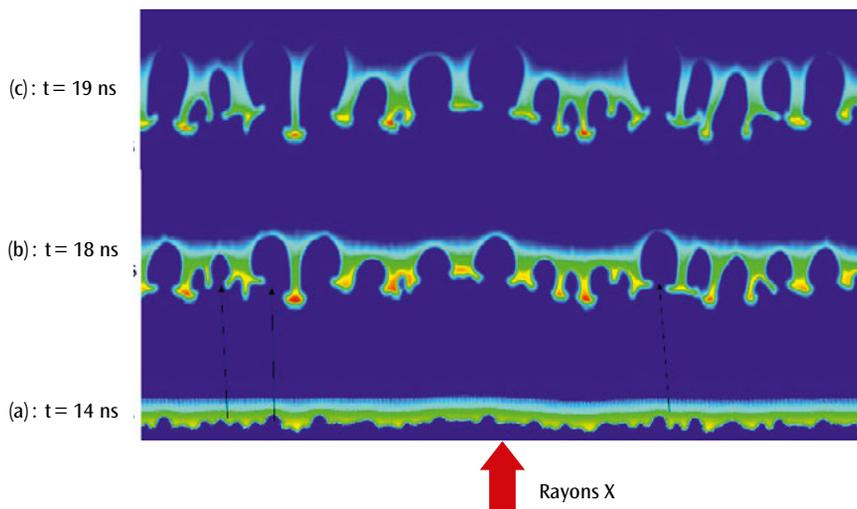


Figure 3. Simulations avec le code FCI2 montrant un régime de compétition entre bulles en attaque indirecte, entre 14 et 18 ns après le début de l'irradiation. L'amplitude quadratique moyenne initiale des perturbations 2D multimodes est de $1 \mu\text{m}$.

compétition entre bulles dans lequel la taille des bulles de l'IRT évolue de façon auto-semblable [3]. Nous détaillons ci-après la configuration expérimentale de l'étude (figure 1) et les résultats escomptés.

Géométrie expérimentale

Nous travaillons avec une demi-cavité remplie de néopentane à température ambiante. Cette géométrie s'inscrit dans la continuité de nos expériences précédentes sur le laser Omega [4]. Elle est plus propice à l'interprétation avec un code 2D axisymétrique car la mesure du flux X à travers le trou d'entrée laser (TEL) est représentative du flux X incident sur l'échantillon. L'échantillon accéléré est collé sur le trou de sortie opposé au TEL. La demi-cavité est chauffée par 60 faisceaux laser provenant du bas de la chambre NIF, soit une énergie totale de l'ordre de 260 kJ. Les mesures principales reposent sur 2 radiographies simultanées. Une radiographie de face vers l'inserteur de diagnostic polaire est utilisée pour mesurer la croissance des modulations de l'IRT. Pour ce faire, une source de radiographie annexe en vanadium est maintenue au moyen d'un capillaire en verre en forme de U devant le TEL de la demi-cavité (figure 2). Cette source de radiographie est irradiée par 16 faisceaux (4 quadruplets) provenant de l'hémisphère supérieur de la chambre. Une seconde source de radiographie, également en vanadium, est positionnée latéralement à la cavité au moyen d'un capillaire en fibre de carbone et est irradiée par un quadruplet.

Évolution d'une perturbation multi-modes

L'impulsion laser des faisceaux de chauffage dure 20 ns et est mise en forme de façon à produire un plateau de température radiative et une phase d'accélération durant 10 ns. Pour un échantillon accéléré présentant un spectre large bande de modulations (longueurs d'onde distribuées uniformément entre $20 \mu\text{m}$ et 1mm , pour une amplitude quadratique des perturbations de $1 \mu\text{m}$), les simulations réalisées avec le code d'hydrodynamique radiative FCI2 montrent

que, conformément aux prévisions théoriques [3], un régime de compétition entre bulles est atteint entre 14 et 18 ns. On observe en effet sur la simulation FCI2 de la figure 3 la coalescence entre petites bulles, pour créer des structures plus grosses. Ce phénomène est tout à fait observable avec la résolution temporelle et spatiale des diagnostics employés [5].

Perspectives

Le premier tir de la proposition a eu lieu le 21 mars 2013. Le but de ce tir était de qualifier la cavité d'un point de vue radiatif et de s'assurer du rapport signal/bruit et du contraste des radiographies qui seront ensuite utilisées pour mesurer la croissance et la mise en vitesse de l'échantillon modulé accéléré par le flux radiatif de la cavité. L'analyse des données obtenues va nous permettre d'affiner les réglages des diagnostics principaux pour le premier tir de mesure de croissance d'instabilités programmé en septembre 2013.

Références

- [1] S. GLENZER *et al.*, "Cryogenic thermonuclear fuel implosion on the National Ignition Facility", *Phys. Plasmas*, **19**, 056318 (2012).
- [2] A. CASNER *et al.*, "Designs for highly nonlinear Ablative Rayleigh-Taylor experiments on the National Ignition Facility", *Phys. Plasmas*, **19**, 082708 (2012).
- [3] D. ORON *et al.*, "Scaling laws of the Rayleigh-Taylor ablation front mixing zone evolution in inertial confinement fusion", *Phys. Plasmas*, **5**, p. 1467-1476 (1998).
- [4] G. HUSER *et al.*, "Reduced ablative Rayleigh-Taylor growth measurements in Indirectly Driven laminated foils", *Phys. Plasmas*, **18**, 012706 (2011).
- [5] A. CASNER *et al.*, "Design and implementation plan for indirect-drive highly nonlinear Ablative Rayleigh-Taylor experiments on the National Ignition Facility", *High Energy Density Phys.*, **9**, p.32-37 (2013).

Description statistique des structures Zeeman dans les plasmas chauds

J.-C. PAIN - F. GILLERON / CEA-DAM Île-de-France

Quantifier l'influence d'un champ magnétique sur les profils de raies spectrales est important en astrophysique, en fusion par confinement inertiel ou encore pour les expériences sur des installations Z-pinch. Les structures Zeeman peuvent être décrites de manière statistique, en utilisant une distribution de Gram-Charlier (Gaussienne multipliée par une combinaison linéaire de polynômes de Hermite) paramétrée par les quatre premiers moments représentant force, énergie, asymétrie et aplatissement. Cette méthode permet d'estimer rapidement et avec une bonne précision l'effet d'un champ magnétique intense sur un spectre.

L'existence de champs magnétiques intenses ($10^2 - 10^5$ T) dans les naines blanches a été confirmée par l'éclatement des raies spectrales dans les domaines visible et UV. Les pulsars et les étoiles à neutrons, découvertes par leur émission dans les domaines des radiofréquences et des rayons X, ont un champ encore plus intense. P. Zeeman (prix Nobel de physique en 1902) observa en 1896 un phénomène dont l'interprétation ne peut se faire complètement que dans le cadre de la physique quantique. Il découvrit qu'en présence d'un champ magnétique, une raie spectrale se décompose en trois groupes de transitions (appelés composantes σ , σ et π) décalés en fréquence et polarisés. L'espacement régulier entre deux composantes successives est proportionnel à l'intensité du champ magnétique. Grâce à l'effet Zeeman, les champs magnétiques peuvent être détectés à de grandes distances par la mesure du rayonnement émis. Ceci a permis à G.E. Hale de

découvrir en 1908 que les taches solaires sont de puissantes sources de champ magnétique pouvant atteindre 0,3 T, soit près de dix mille fois la valeur du champ terrestre (**figure 1**).

En fusion par confinement inertiel, les champs magnétiques auto-générés peuvent atteindre plusieurs centaines de teslas. L'existence d'un fort champ magnétique dans la capsule avant la compression est plutôt bénéfique car cela permet de réduire les pertes par conduction électronique.

Ce travail concerne la prise en compte des champs magnétiques intenses dans les calculs d'opacité et d'émissivité. Du fait du grand nombre de raies dans les plasmas chauds, le calcul exact est quasiment impossible et même inutile du fait de la coalescence des raies provoquée par les autres élargissements physiques (Doppler, Stark,...). Il est possible de calculer analytiquement les moments de la distribution des énergies des composantes Zeeman pondérées par leurs forces. La connais-

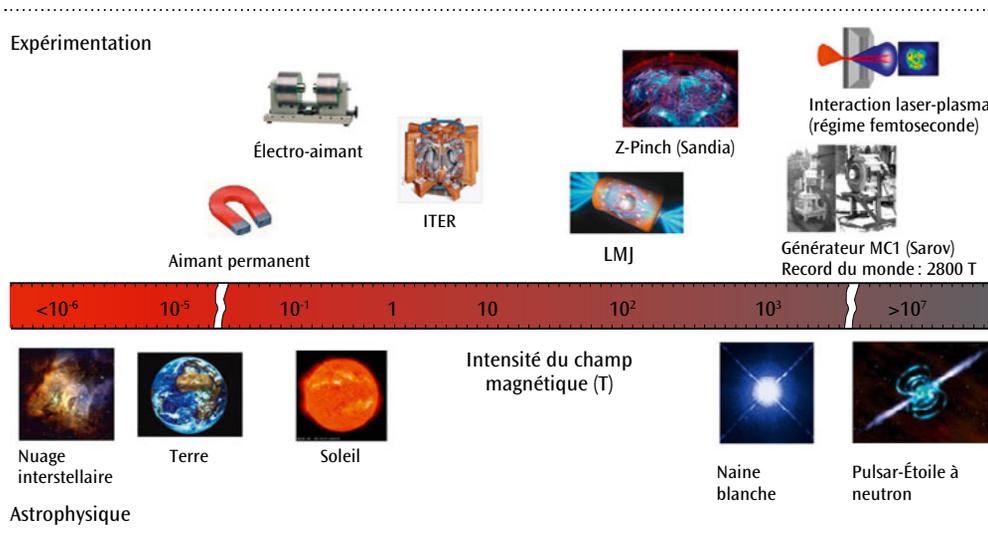


Figure 1. Ordre de grandeur du champ magnétique en teslas (T) pour différents «objets» astrophysiques et instruments scientifiques.

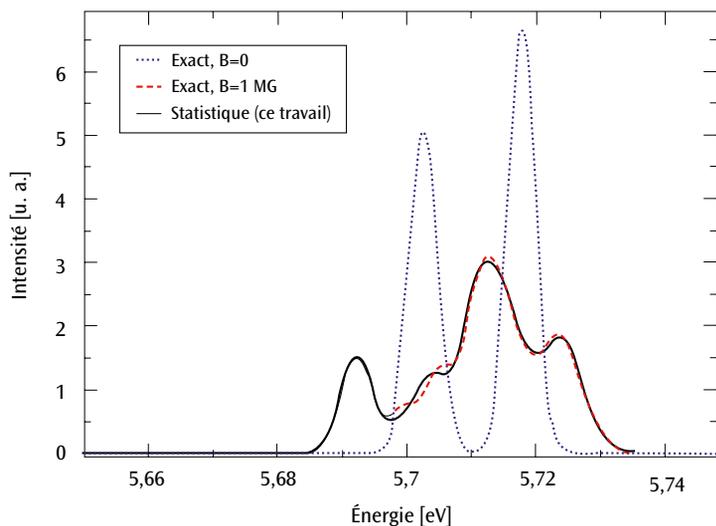


Figure 2. Effet d'un champ magnétique de 100 T sur la transition « triplet » : $(1s2s) \ ^3S \rightarrow (1s2p) \ ^3P$ de C^{++} avec une largeur de convolution de 0,005 eV. L'angle d'observation θ est tel que $\cos^2(\theta)=1/3$.

sance de ces moments permet, en utilisant une distribution statistique, de modéliser l'effet du champ magnétique sur les spectres atomiques, sans avoir à effectuer la diagonalisation de la matrice hamiltonienne décrivant l'effet Zeeman.

Intensité et calcul des moments

Dans ce travail, l'effet Hanle (réduction de la polarisation de la lumière lorsque les atomes émetteurs sont soumis à un champ magnétique, et quand ils ont eux-mêmes été excités par une lumière polarisée) et l'effet Faraday (rotation du plan de polarisation proportionnelle à la composante du champ magnétique sur la direction de propagation de la lumière) ne sont pas pris en compte. En présence d'un champ magnétique, un niveau J d'énergie E se scinde en $2J + 1$ états M ($|M| \leq J$) d'énergie $E + \mu_B B g M$, où B est l'intensité du champ magnétique, μ_B le magnéton de Bohr et g le facteur de Landé du niveau. Les transitions entre états quantiques de deux niveaux différents se regroupent en trois composantes associées aux règles de sélection $\Delta M = q$, où la polarisation q est égale à 0 pour une composante π (polarisation parallèle au champ magnétique) et à ± 1 pour une composante σ_{\pm} (polarisation perpendiculaire au champ magnétique).

L'intensité d'une raie détectée avec un angle d'observation θ par rapport à la direction du champ magnétique est généralement une combinaison des intensités de ces polarisations. L'intensité d'une composante particulière peut être caractérisée par les moments de la distribution des énergies pondérées par les forces, moments qui peuvent être calculés analytiquement grâce à l'algèbre de Racah [1-4] ou au moyen de polynômes de Bernoulli [1]. En général, on obtient une bonne représentation statistique en se limitant aux quatre premiers moments caractérisant la position, la largeur, l'asymétrie et l'aplatissement.

Modélisation statistique

L'intensité d'une composante peut se calculer par un développement en série de Taylor autour de l'énergie de la raie en l'absence de champ. Dans l'hypothèse où le profil de raie est une Gaussienne, on obtient une somme de polynômes de Hermite (formule de Rodrigues) [1] multipliée par une Gaussienne. À l'ordre 2, cette méthode nous a fourni une expression analytique de la largeur de raie permettant d'estimer la valeur du champ magnétique à partir d'une mesure [4,5]. Cependant, ce développement n'est valide que pour des champs relativement faibles ($\mu_B B$ inférieur aux autres largeurs physiques). Nous avons proposé une approche plus générale, consistant à modéliser l'effet du champ magnétique sur une composante Zeeman par un développement de Gram-Charlier à l'ordre 4. Le profil global associé à une composante particulière résulte alors de la convolution d'une fonction gaussienne multipliée par une combinaison linéaire de polynômes de Hermite avec les profils associés aux autres processus d'élargissements physiques.

Cette approche statistique [4] permet de prendre en compte de manière rapide l'effet Zeeman sur les spectres atomiques détaillés avec une bonne précision, comme le montre la comparaison avec un calcul exact sur la **figure 2**.

Références

- [1] G. MATHYS, J.O. STENFLO, "Anomalous Zeeman effect and its influence on the line absorption and dispersion coefficients", *Astron. Astrophys.*, **171**, p. 368-377 (1987).
- [2] J. BAUCHE, J. OREG, "Quick interpretation of unresolved hyperfine and/or Zeeman structures in stellar spectra", *J. Phys. Coll. C1*, **49**, p. 263-265 (1988).
- [3] P. DALLOT, "Influence of an intense magnetic field on transition arrays", *Phys. Rev. A*, **53**, p. 4007-4013 (1996).
- [4] J.-C. PAIN, F. GILLERON, "Characterization of anomalous Zeeman patterns in complex spectra", *Phys. Rev. A*, **85**, 033409 (2012).
- [5] J.-C. PAIN, F. GILLERON, "Description of anomalous Zeeman patterns in stellar astrophysics", *EAS Publications Series*, **58**, p. 43-50 (2012).

Évaluation des flux d'électrons dans la magnétosphère

■ D. MOURENAS - J.-F. RIPOLL / CEA-DAM Île-de-France

Les satellites sont constamment soumis aux électrons énergétiques en provenance du soleil qui sont piégés par le champ magnétique terrestre dans des ceintures de radiations. Les doses reçues par l'électronique dépendent fortement de l'activité solaire et de la dynamique de la magnétosphère, en particulier des ondes électromagnétiques qui transportent les électrons d'une ligne de champ à une autre ou les précipitent dans l'atmosphère. L'objet de ce travail est le calcul analytique du temps de vie de ces électrons, nécessaire aux calculs de dose et utilisable dans des modèles globaux de prévision de météorologie spatiale. Leur utilisation pourrait à terme accélérer ces modèles et aider à estimer leur fiabilité.

La Terre est soumise en permanence au vent solaire, un flux de particules chargées éjecté de la haute atmosphère du soleil, et à des éjections de masse en provenance de ce même astre. Le champ géomagnétique sert de bouclier à la Terre, la protégeant de ces flux de particules dont il infléchit la trajectoire comme une étrave, protégeant en partie les satellites (figure 1). En période de forte activité solaire, la pression du vent solaire devient telle que ce bouclier magnétique est repoussé plus près de la Terre : c'est ce qu'on appelle des orages magnétiques ou encore des tempêtes solaires. Alors, les satellites qui traversent les ceintures de radiations de Van Allen (figure 2) sont moins protégés.

L'électronique des satellites est très sensible aux flux d'électrons d'énergie E supérieure à 1 MeV [1]. Récemment, plusieurs satellites ont

ainsi été rendus inopérants suite à des tempêtes solaires. Étant donné le coût élevé des satellites et leur importance croissante pour la défense et les échanges économiques, il est souhaitable de disposer d'une météorologie spatiale, c'est-à-dire de moyens de surveillance et de prévision des risques pour les satellites en fonction des conditions naturelles très variables induites par l'activité solaire [1].

Des satellites de surveillance sont d'ores et déjà positionnés pour mesurer les fluctuations du vent solaire. Des codes de magnétohydrodynamique (MHD) et particuliers sont aussi développés pour rendre compte de la déformation des ceintures de Van Allen au cours des orages et des variations des flux d'électrons sur les orbites des satellites. L'objectif est de calculer la dose totale D de radiations (en rads) reçue par un satellite en

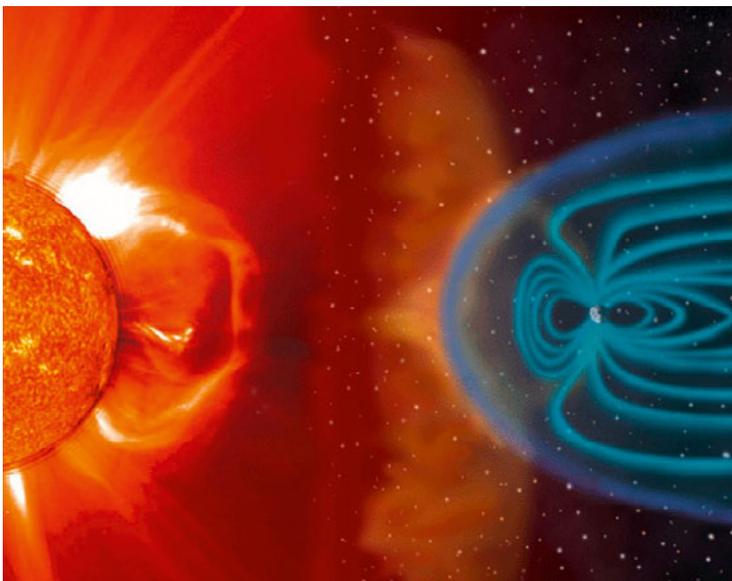


Figure 1. Illustration d'une éruption solaire, du vent solaire et du champ géomagnétique qui entoure et protège la Terre. Lors d'orages magnétiques, le flux de particules peut devenir suffisamment important pour endommager l'électronique des satellites en orbite (© NASA).

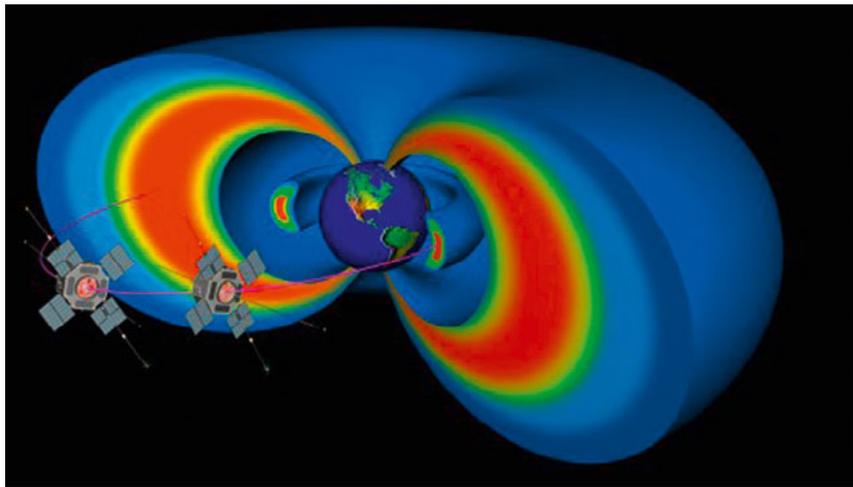


Figure 2. Les deux ceintures de radiations qui entourent la Terre et les satellites en orbite qui les traversent. Découvertes en 1958 par Van Allen, elles sont constituées d'une population d'électrons énergétiques piégés sur les lignes de champ magnétique terrestre (© JH-APL).

quelques mois: $D \sim 10^{-8} F \times \tau$, avec F le flux omnidirectionnel initial d'électrons énergétiques (en $e/cm^2/s$). Mais pour ce faire, les codes globaux doivent disposer d'évaluations des temps de vie τ des électrons piégés, habituellement effectuées avec d'autres codes de type Fokker-Planck, très coûteux en temps de calcul. Cela limite actuellement l'utilisation des temps de vie dans les codes de *météorologie spatiale* à des valeurs tabulées pour des conditions naturelles fixées, réduisant par conséquent la précision des simulations. En outre, cela empêche de déterminer la sensibilité des résultats des simulations globales des ceintures de radiations aux conditions naturelles.

Un modèle analytique approché du temps de vie τ des électrons a été développé au CEA - DAM Île-de-France, permettant de décrire leur précipitation dans l'ionosphère par les ondes électromagnétiques naturelles de très basse fréquence de type «sifflement», sur des orbites relativement proches de la Terre [2]. Ce modèle est basé sur différentes simplifications idoines du calcul de τ , dont la formulation exacte contient cinq intégrales imbriquées, en angle d'attaque des particules, latitude géomagnétique, fréquence et angle des ondes et harmoniques cyclotroniques. Les approximations employées permettent des intégrations analytiques par parties et conduisent *in fine* à une expression analytique de τ en fonction de la fréquence moyenne et de la largeur de la distribution en angle des ondes, de leur intensité, et des paramètres de la magnétosphère.

Les formules analytiques obtenues ont été validées par comparaison à des simulations numériques complètes réalisées avec le code Fokker-Planck du CEA - DAM Île-de-France (figure 3). Ce modèle a ensuite été amélioré en collaboration avec le CNRS (LPC2E) en étendant son domaine d'utilisation jusqu'aux orbites GPS et géostationnaires [3]. Son utilisation pourrait à terme accélérer les prévisions de *météorologie spatiale*, mais aussi aider à estimer leur fiabilité. Ce modèle pourrait

surtout permettre de déterminer les paramètres (plasma/ondes) que devraient mesurer en priorité les satellites de surveillance, et les processus les plus critiques pour une évaluation précise de l'évolution des flux d'électrons dans la magnétosphère.

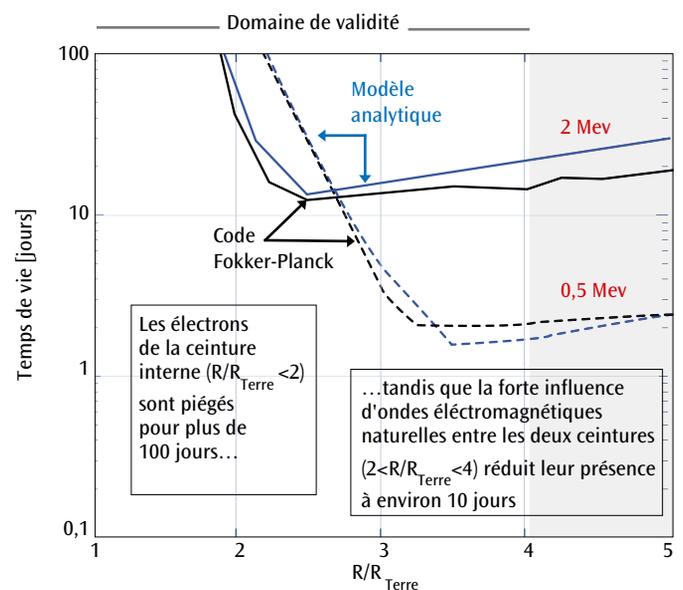


Figure 3. Temps de vie des électrons en jours dans les ceintures de Van Allen en fonction de la distance à la Terre au niveau de l'équateur. Comparaisons entre le modèle analytique et les résultats d'un code Fokker-Planck.

Références

- [1] N. IUCCI, *et al.*, "Space weather conditions and spacecraft anomalies in different orbits", *Space Weather*, 3, S01001 (2005).
- [2] D. MOURENAS, J.-F. RIPOLL, "Analytical estimates of quasi-linear diffusion coefficients and electron lifetimes in the inner radiation belt", *J. Geophys. Res.*, 117, A01204 (2012).
- [3] D. MOURENAS, A. ARTEMYEV, J.-F. RIPOLL, O. AGAPITOV, V. KRASNOSELSKIKH, "Timescales for electron quasi-linear diffusion by parallel and oblique lower-band chorus waves", *J. Geophys. Res.*, 117, A06234 (2012).

Simulation de l'éjection de matière sous choc par dynamique moléculaire

O. DURAND - L. SOULARD / CEA-DAM Île-de-France

Lorsqu'un matériau métallique est traversé par une onde de choc très intense, sa surface libre peut passer en fusion à la réflexion de l'onde et éjecter un nuage de particules micrométriques (éjecta). Les hétérogénéités métallurgiques et géométriques de la surface sont la principale cause de ce phénomène. Sa restitution par un code de calcul macroscopique est à l'heure actuelle très difficile car les mécanismes et propriétés physiques mis en jeu dans ces conditions extrêmes sont encore loin d'être parfaitement modélisés. Nous développons depuis peu une approche inédite au CEA/DAM qui consiste à simuler l'éjection à l'échelle atomistique par dynamique moléculaire. Cette approche apporte beaucoup à la compréhension du phénomène car elle permet de mesurer des distributions de tailles de particules et d'identifier ainsi des mécanismes élémentaires de fragmentation, transposables, dans une certaine mesure, au monde macroscopique.

L'approche atomistique pour simuler l'éjection offre plusieurs avantages : elle permet de s'affranchir de tout effet de maillage et d'approximation de modèle physique inhérents à une approche macroscopique, puisque le comportement de la matière est simulé directement à partir du mouvement des atomes. En revanche, elle ne permet de traiter que des systèmes de taille nanométrique ; elle se veut donc complémentaire de l'approche macroscopique. Afin d'étudier l'éjection par cette approche et de bénéficier d'une statistique suffisante pour les éjecta, nous avons développé une nouvelle méthode (méthode hybride) permettant de traiter des systèmes de plusieurs centaines de millions d'atomes sur des temps de calcul raisonnables [1]. Nous avons également développé des outils d'analyse spécifiques pour mesurer la forme et la taille des agrégats [1].

Le principe de la méthode hybride consiste à séparer le système en une zone volumique et une zone surfacique (figure 1), et à les traiter différemment durant la phase d'initialisation. Les atomes de la zone volumique sont portés dans un état de choc correspondant à une densité donnée par un calcul de quasi-équilibre. Par ce biais, le temps physique de simulation est indépendant du nombre d'atomes et convient donc à des systèmes de grande taille. La zone surfacique est équilibrée simultanément à pression quasi nulle et à 300 K. L'équilibre atteint dans les deux zones, les particules de la zone volumique sont mises en mouvement avec la vitesse matérielle u_p correspondant à l'état de choc, et le calcul se poursuit pour les deux zones dans l'ensemble microcanonique afin de rendre compte du

caractère hors équilibre de l'éjection. Les simulations sont réalisées à l'aide du code Stamp du CEA/DAM, en parallèle, sur typiquement 4 000 cœurs du calculateur Tera 100. Elles profitent pleinement des moyens de calcul actuels de la DAM.

Dans l'exemple décrit sur la figure 1, un cristal de cuivre, de dimensions 176 nm × 88 nm × 88 nm et contenant environ 125 millions d'atomes, est mis au contact du vide. Il présente une rugosité de surface sinusoïdale de période 29,3 nm et de profondeur 10 nm ; il est soumis à un choc se propageant dans la direction O_x ($u_p = 3\,636$ m/s). La figure 2 montre l'évolution du système aux premiers instants de l'éjection (typiquement 60 ps après le début de l'éjection) et à des instants plus tardifs (200 et 800 ps). Aux premiers instants, l'in-

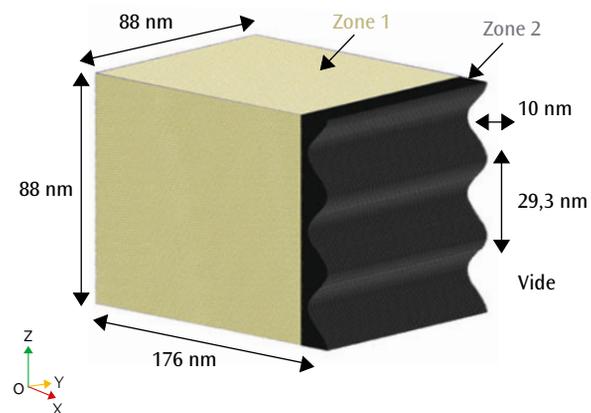


Figure 1. Principe de la méthode hybride. Le système est séparé en une zone volumique (zone 1) et une zone surfacique (zone 2) traitées différemment afin de diminuer sensiblement le temps de calcul.

teraction de l'onde de choc plane avec les vallées de la sinusoïde donne naissance à 3 nappes d'atomes qui commencent à se fragmenter différemment, de manière stochastique, en raison de la forte agitation thermique des atomes.

À des instants plus tardifs, typiquement au-delà de 200 ps, la fragmentation des nappes est bien développée et les filaments de métal liquide qui en résultent finissent par se détacher complètement du reste du cristal. Ce dernier peut alors être éliminé des calculs, rendant les simulations moins coûteuses, qui peuvent être poursuivies sur des temps longs (typiquement 1 ns). La fragmentation la plus tardive est celle de la tête de jet qui reste intègre et cylindrique jusqu'à environ 200 ps. Au-delà de 800 ps, toutes les particules sont devenues sphériques.

Les distributions sur une échelle log-log, à différents instants au-delà de 200 ps, du nombre N de particules éjectées en fonction de leur volume V sont reportées sur la **figure 3**. Elles sont identiques et montrent que le système a atteint un état stable. Elles suivent un comportement générique composé de 3 parties distinctes. La première partie concerne les plus petits agrégats: elle est

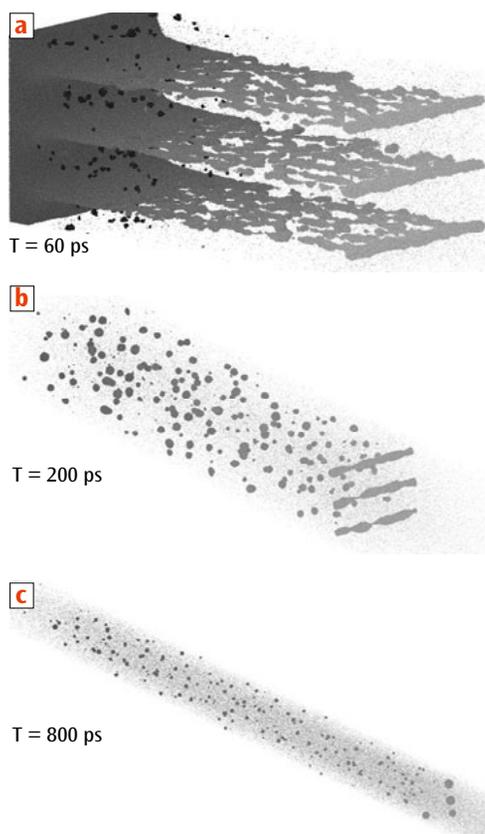


Figure 2. Évolution du système (vue oblique). (a) : aux premiers instants de l'éjection, typiquement 60 ps après le début de l'éjection, (b) : 200 ps et (c) : 800 ps après le début de l'éjection. Au-delà de 800 ps, toutes les particules sont devenues sphériques

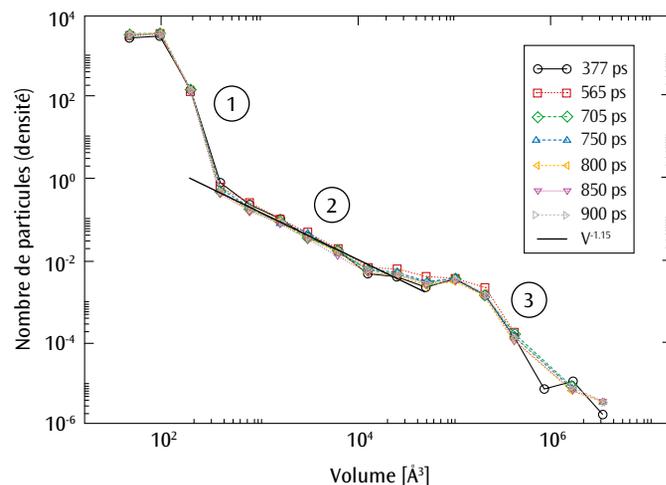


Figure 3. Distribution sur une échelle log-log du nombre de particules éjectées en fonction de leur volume, pour différents instants au-delà de 200 ps.

attribuée à l'évaporation (atomisation) du métal liquide visible sur la **figure 2** autour des nappes. La partie du milieu correspond à une variation en loi de puissance de type $N(V) \propto V^{-\alpha}$, avec $\alpha \sim 1,15$, et la dernière partie obéit à une forme exponentielle. Ces deux dernières lois se retrouvent très communément dans les études publiées sur la fragmentation, en ayant pour origine des mécanismes bien distincts [2]. Le mécanisme à l'origine de la loi de puissance fait encore l'objet de débats, mais l'existence d'une telle loi présente un intérêt car, à l'inverse d'une exponentielle, elle ne fait appel à aucune grandeur caractéristique: elle résulte en général d'un phénomène invariant d'échelle. Elle devrait donc également exister à des échelles supérieures aux nôtres, notamment micrométriques. Ce point très important reste à confirmer.

L'approche que nous développons pour simuler l'éjection de matière par dynamique moléculaire montre donc son intérêt et semble très prometteuse. Elle permet d'accéder à des distributions de tailles de particules et d'identifier des mécanismes distincts de fragmentation. Cette première étude porte sur le cuivre mais nous avons également entamé des simulations avec l'étain afin de rendre plus facile une comparaison simulation-expérience. Par ailleurs, l'origine des deux composantes de la distribution fait actuellement l'objet d'une étude approfondie.

Références

- [1] O. DURAND, L. SOULARD, "Large-scale molecular dynamics study of jet breakup and ejecta production from shock-loaded copper with a hybrid method", *J. Appl. Phys.*, **111**, 044901 (2012).
- [2] D. E. GRADY, "Length scales and size distributions in dynamic fragmentation", *Int. J. Fract.*, **163**, p. 85-99 (2010).

Fluctuations quantiques des noyaux et structures de l'hydrogène solide sous très hautes pressions : une compréhension par la simulation

■ G. GENESTE - F. BOTTIN - M. TORRENT - P. LOUBEYRE / CEA-DAM Île-de-France

Grâce à la théorie de la fonctionnelle de la densité électronique, on peut maintenant simuler de manière très prédictive les propriétés de la matière condensée, comme les changements de structure des éléments sous pression. De par la simplicité électronique de l'hydrogène, le diagramme de phase de cet élément devrait être l'un des mieux calculés. Mais pour comprendre l'hydrogène dense, il faut prendre en compte la dispersion quantique des noyaux. C'est un problème difficile. Il peut maintenant être traité en utilisant le formalisme de l'intégrale de chemins, développé par R. Feynman il y a plus de 50 ans, et la puissance de calcul des ordinateurs pétaflopiques actuels. Nous venons ainsi de montrer que H_2 et D_2 , à l'état solide, adoptent des structures différentes dans le domaine des 100 GPa, avec pour H_2 une structure qui n'a pas d'équivalent pour un solide classique.

L'étude de la structure des isotopes d'hydrogène solide à basse température et pour de faibles pressions (< 1 GPa), a fait l'objet de très nombreux travaux au cours des années 1970. La constante de rotation de la molécule d'hydrogène est très élevée (~ 85 K). Les différences entre les niveaux de rotation sont multiples de cette valeur, ce qui conduit à une description discrète, donc quantique de l'état de rotation de la molécule à basse température. De plus, la parité des niveaux de rotation est définie par l'état de spin nucléaire des deux noyaux. Enfin, l'état de rotation de la molécule, en modifiant la distribution du nuage électronique de la molécule, influence directement sur l'interaction entre molécules. C'est un problème quantique à N corps. Dans les années 1970, sa résolution a été effectuée en modélisant les interactions de paires entre molécules avec une dépendance de l'état de rotation de la molécule [1]. L'état fondamental est remarquable : c'est un solide de structure hexagonal compact dans lequel les molécules tournent librement sur elles-mêmes de manière sphérique en adoptant le niveau de rotation fondamental ($J=0$). Les niveaux de rotations plus élevés ont une énergie cinétique plus grande mais abaissent l'énergie d'interaction entre molécules. Sous pression cependant, le gain d'interaction obtenu en adoptant des niveaux de rotation plus élevés permet de compenser l'augmentation d'énergie cinétique. L'état rotateur libre n'est ainsi plus l'état fondamental. L'hydrogène solide adopte une nouvelle structure, la « phase II » (autour de 30 GPa pour D_2 et 110 GPa pour H_2). Une mesure par diffraction de rayons X et de neutrons

sur monocristal dans une presse à enclumes de diamant n'a pas permis de résoudre la structure de la phase II, mais a montré que les structures proposées jusqu'à présent n'étaient pas en accord avec l'expérience [2]. Les prédictions les plus avancées des structures de la phase II ont été obtenues par des calculs de structure électronique qui permettent de calculer le changement des interactions entre molécules, en modélisant les électrons par la mécanique quantique dans le formalisme de la « théorie de la fonctionnelle de la densité » (DFT). Mais le caractère quantique du mouvement des noyaux n'avait pas été pris en compte dans ces calculs, ce qui peut expliquer ce désaccord théorie-expérience.

L'hydrogène dense ne peut donc être correctement appréhendé dans ce domaine de températures

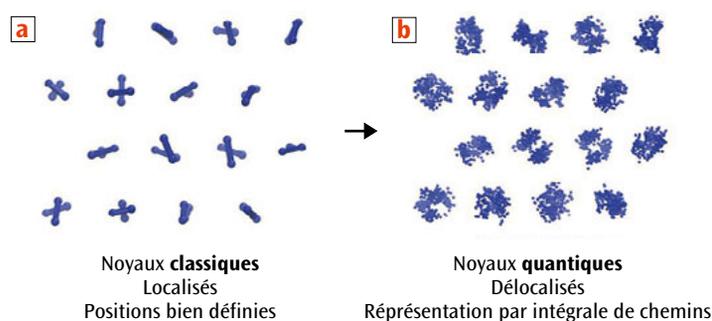


Figure 1. Représentation des noyaux atomiques par intégrale de chemins (exemple de l'hydrogène dense à 30 GPa et $T = 80$ K). Les noyaux classiques (a) sont remplacés par un grand nombre de particules fictives (b) reliées les unes aux autres par des ressorts formant un anneau qui se referme sur lui-même (non visibles sur le dessin).

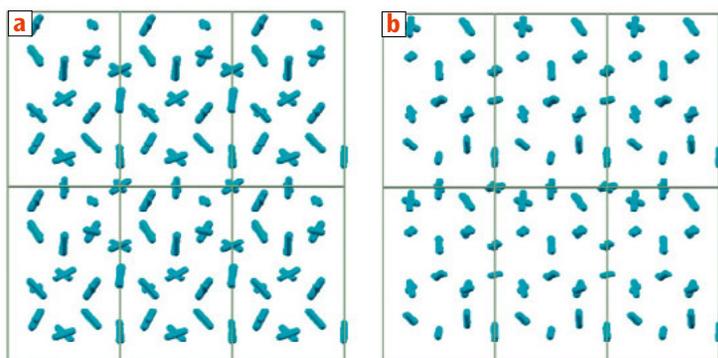


Figure 2. Structures moyennes (au sens de la physique quantique) de la phase II de D_2 (a) et de H_2 (b) établies par simulations couplant DFT pour les électrons et intégrale de chemins pour les noyaux.

qu'en considérant les noyaux comme quantiques. Or, en physique de la matière condensée et en chimie quantique, seuls les électrons sont généralement traités comme des objets quantiques par la DFT. Dans le cas présent, il nous faut donc ajouter la dimension quantique au mouvement des protons. En physique quantique, une particule ne possède plus une position bien déterminée à chaque instant, et la notion de trajectoire n'a plus de sens. Il est seulement possible de donner une amplitude de probabilité à chaque résultat de mesure de position possible. Cette amplitude de probabilité est donnée par la fonction d'onde du système. Ceci peut être fait en utilisant une formulation de la physique quantique appelée « intégrale de chemins », développée par Feynman dans les années 1950. L'intégrale de chemins rend compte de cette délocalisation puisque chaque proton est remplacé par un grand nombre de particules fictives reliées les unes aux autres par des ressorts (figure 1). Ce nuage de particules fictives reproduit la densité de probabilité de présence des protons, et le nombre de particules à prendre en compte dans la simulation est d'autant plus grand que la température est basse. Nous aboutissons donc à une méthode mixte dans laquelle les électrons et les protons sont quantiquement décrits, les premiers par DFT, et les seconds par l'intégrale de chemins. Dans le cas présent, il a fallu monter jusqu'à 64 et 128 particules fictives, multipliant par ce même nombre la puissance de calcul nécessaire à la simulation du système quantique. Par conséquent, simuler complètement les propriétés d'un système quantique (noyaux et électrons) nécessite une puissance de calcul se chiffrant en millions d'heures CPU, que seuls des supercalculateurs modernes peuvent fournir, et des algorithmes très pointus notamment en matière de parallélisation. Chacun des calculs a été réalisé en parallèle sur plus d'un millier de processeurs, sur le supercalculateur Tera 100 du CEA/DAM, à l'aide du code de calcul ABINIT (<http://www.abinit.org>).

Nous avons ainsi pu simuler les structures stables de H_2 et D_2 en fonction de la pression à basse

température ($T=80$ K) [3]. Nous obtenons d'abord la phase de rotateurs libres pour les deux isotopes. À très basse température, ce sont les fluctuations quantiques qui sont responsables de la libre rotation des molécules sur elles-mêmes, car chaque molécule est « gelée » dans son état rotationnel fondamental. En augmentant la pression, la distribution angulaire des molécules se structure. Autour de 70 GPa pour D_2 et 120 GPa pour H_2 , une discontinuité dans cette distribution apparaît. C'est la transition de phase vers la phase II. Une différence assez nette entre la phase II de l'hydrogène et celle du deutérium, plus lourd et donc moins impacté par les fluctuations quantiques, est observée. On parle d'effet isotopique. En particulier, en phase II, l'hydrogène conserve des degrés de liberté de rotation tandis que les orientations moléculaires dans D_2 sont relativement bien définies, la structure déterminée étant une structure monoclinique de très basse symétrie (figure 2). Pour H_2 , la transition de phase est subtile. La distribution angulaire moyenne des molécules ne change pas, mais des orientations privilégiées apparaissent un plan sur deux, caractérisant une brisure de symétrie. Dans cette structure, la direction la plus probable des molécules est différente de la moyenne de leur probabilité angulaire. Cela caractérise un solide quantique qui n'a pas d'équivalent classique.

En augmentant la pression, vers 140 GPa, une transition de phase est observée vers une structure différente, aux orientations moléculaires bien définies. Cela correspond à la phase III de l'hydrogène. La résolution de cette structure est en cours. Au-delà de ~ 300 GPa, ce système deviendrait métallique, adoptant des structures cristallines atomiques, et peut-être même supraconducteur avec des températures critiques très élevées, toujours en raison de la légèreté des noyaux et du fort couplage électrons/phonons dans le système [4]. Nous poursuivons l'étude de ces effets dans une double approche théorique et expérimentale.

Références

- [1] I. SILVERA, "The solid molecular hydrogens in the condensed phase: Fundamentals and static properties", *Rev. Mod. Phys.*, **52**, p. 393-452 (1980).
- [2] I. GONCHARENKO, P. LOUBEYRE, "Neutron and X-ray diffraction study of the broken symmetry phase transition in solid deuterium", *Nature*, **435**, p. 1206-1209 (2005).
- [3] G. GENESTE, M. TORRENT, F. BOTTIN, P. LOUBEYRE, "Strong isotope effect in phase II of dense solid Hydrogen and Deuterium", *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 155303 (2012).
- [4] J. M. MCMAHON, D. M. CEPERLEY, "High-temperature superconductivity in atomic metallic hydrogen", *Phys. Rev. B*, **84**, 144515 (2011).

Le noyau atomique : du liquide quantique à la molécule

J.-P. EBRAN / CEA-DAM Île-de-France

E. KHAN / Institut de physique nucléaire, Orsay, France

T. NIKŠIĆ - D. VRETENAR / Université de Zagreb, Croatie

Dans le cadre des approches de type théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) appliquées à la physique nucléaire, une nouvelle condition influençant la formation d'agrégats de nucléons dans le noyau atomique a été mise en exergue. La profondeur du potentiel moyen dans lequel évoluent les nucléons a une incidence directe sur la localisation des orbitales nucléoniques. Le degré de localisation de ces orbitales, relativement à la distance moyenne des nucléons dans le noyau, conditionne la phase dans laquelle se trouve celui-ci : liquide quantique ou cristal de Wigner. Il permet en outre d'interpréter l'état moléculaire des noyaux comme une phase hybride, intermédiaire entre le liquide quantique et le solide.

Goutte liquide, molécule, halo, bulle... Autant de manifestations de la richesse des systèmes nucléaires, conséquence de la nature particulière des interactions entre nucléons – une partie d'entre elles est une réminiscence des interactions fortes entre quarks et gluons – dans un contexte de problématique à N corps où les effets de taille finie sont importants. Aussi, la représentation du noyau atomique en termes d'une assemblée de nucléons se répartissant de façon quasi homogène dans le volume nucléaire, autrement dit d'un liquide quantique, n'est-elle pas toujours adaptée. En particulier, les nucléons peuvent s'arranger en agrégats (clusters) [1], sous-structures liées au sein même du noyau. À l'heure actuelle, l'origine du phénomène d'agrégation dans les systèmes nucléaires est mal comprise. Dans un travail récent [2], une nouvelle condition nécessaire à la formation de structures agrégées dans

les noyaux atomiques a été mise en évidence dans le cadre d'une approche de type DFT apte à traiter, dans un cadre unifié, leurs natures liquide quantique et agrégat.

Liquide quantique ou agrégat ?

Les approches de type DFT telles qu'elles sont employées en physique nucléaire représentent le système de A nucléons en interaction par un système de A quasi-particules indépendantes, évoluant dans un potentiel moyen prenant en compte les corrélations nucléoniques de courtes portées. La profondeur de ce potentiel confinant les nucléons à l'intérieur du noyau pilote le degré de dispersion des orbitales nucléoniques, de sorte qu'un potentiel d'autant plus profond conduit à de telles orbitales d'autant plus localisées, favorisant l'émergence de structures en agrégats dans les systèmes nucléaires concernés.

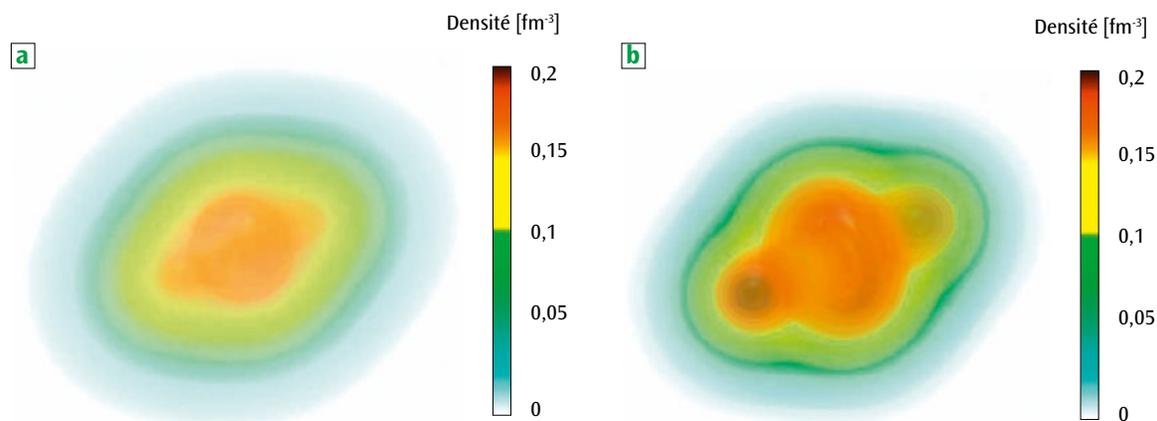


Figure 1. Densité du néon-20 dans son état fondamental issue d'une approche de type DFT non relativiste (a) et de son homologue relativiste (b).

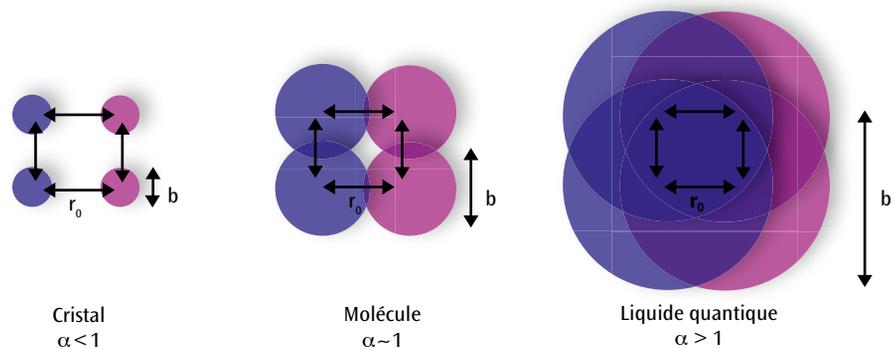


Figure 2. Schéma des phases thermodynamiques associées au paramètre α , rapport de la dispersion b des orbitales nucléoniques et de la distance moyenne r_0 des nucléons dans le noyau.

Pour illustrer cette propriété, il est possible de faire appel à deux classes d'approche de type DFT intervenant en physique nucléaire. La première traite le noyau comme un système de nucléons non relativistes. La seconde estime importante la prise en compte des symétries de Lorentz pour l'étude des systèmes nucléaires. La dynamique des nucléons dans le noyau est alors décrite dans un cadre covariant, leurs interactions dans le milieu nucléaire étant représentées par l'échange de mésons effectifs. La **figure 1** présente les profils de densité nucléonique du néon-20 obtenus à partir de ces deux classes d'approche. Alors que toutes deux reproduisent avec succès les observables du néon-20, la densité nucléonique de l'approche non relativiste est caractéristique d'un liquide quantique (répartition homogène des nucléons dans le volume nucléaire déformé), tandis que celle de l'approche relativiste correspond à une structure en agrégat α - ^{12}C - α . La différence principale entre les deux approches réside dans la profondeur du potentiel moyen, plus grande dans le cas relativiste.

Les données expérimentales ne fournissent pas de contraintes sur la profondeur de potentiel. En revanche, elles renseignent sur la valeur du potentiel spin-orbite, une des contributions au potentiel d'interaction entre nucléons dans le milieu. Or, contrairement au cas non relativiste qui ajoute la contribution spin-orbite de façon *ad hoc*, cette dernière émerge naturellement dans un formalisme covariant et se trouve reliée au potentiel central. Par conséquent, dès lors que l'on adopte une description relativiste de la dynamique nucléonique, une bonne reproduction des propriétés inhérentes au potentiel spin-orbite nous assure un traitement réaliste du potentiel central, et donc une profondeur de potentiel correcte.

Une mesure du degré de localisation des orbitales nucléoniques est donnée par le rapport de la dispersion moyenne de ces dernières et de la distance moyenne des nucléons dans le noyau (**figure 2**). Lorsque ce rapport est grand devant 1,

les nucléons sont délocalisés dans le noyau. Leurs orbitales occupent une grande partie du volume nucléaire et présentent un chevauchement important résultant en une densité totale homogène : le noyau est dans une phase de type liquide quantique. Dans celle-ci, les fluctuations quantiques restent significatives même dans l'état fondamental en raison d'un potentiel d'interaction trop faible relativement à sa portée pour localiser les nucléons dans le noyau. Au contraire, un rapport petit devant 1 correspond à une phase de type cristal de Wigner dans laquelle les nucléons se trouvent localisés aux sites d'un réseau. Lorsque le rapport est proche de 1, le noyau se trouve dans une phase hybride dans laquelle peuvent émerger des structures en agrégats, pourvu que d'autres conditions soient réalisées (déformation et proximité du *continuum* entre autres). La phase thermodynamique correspondante maximise la probabilité pour que deux protons et deux neutrons se retrouvent dans un espace de taille suffisamment restreinte pour que les corrélations nucléoniques en forment un état lié.

Conclusion

La reproduction de structures en agglomérats dans les approches de type DFT met en avant la capacité de ces dernières à traiter, dans un cadre unifié, les natures liquide quantique et agrégat des noyaux atomiques. En outre, l'influence démontrée de la profondeur de potentiel sur l'émergence de telles structures rend possible l'affinement des potentiels moyens intervenant au sein des approches non relativistes.

Références

- [1] C.F.V. WEIZSÄCKER, "Neuere Modellvorstellungen über den Bau der Atomkerne", *Naturwissenschaften*, **26**, p. 209-217 (1938).
- [2] J.-P. EBRAN, E. KHAN, T. NIKSIC, D. VRETNAR, "How Atomic Nuclei Cluster", *Nature*, **487**, p. 341-344 (2012).

L'état isomère du ^{43}S est-il sphérique ?

J.-M. DAUGAS - L. GAUDEFROY - R. CHEVRIER / CEA-DAM Île-de-France

L'évolution de la structure des noyaux radioactifs de plus en plus éloignés de la vallée de stabilité au voisinage des couches dites magiques, est un axe de recherche important pour la compréhension de la matière nucléaire. Les études réalisées auprès des installations, sans cesse plus performantes, ont permis d'accéder à des noyaux jusqu'alors inaccessibles. Ainsi, la mise en évidence de la disparition de la couche magique $N = 28$ dans les noyaux riches en neutrons a été prouvée expérimentalement.

L'étude de la structure nucléaire des noyaux radioactifs très éloignés de la vallée de stabilité, permet de valider ou de mettre à mal les prédictions théoriques et d'apporter une pierre à l'édifice afin de comprendre la matière nucléaire dans des conditions extrêmes. Au voisinage des couches dites magiques (nombre de protons Z ou de neutrons N égal à 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126), où le système nucléaire est attendu plus stable que les noyaux voisins, les propriétés de structure nucléaire sont susceptibles d'évoluer fortement lorsque l'on s'éloigne des noyaux stables (figure 1). Cette évolution se manifeste par une modification importante des énergies séparant les couches nucléaires, une déformation des noyaux et l'apparition d'états isomères. L'évolution des propriétés de structure nucléaire est susceptible d'induire aussi des modifications importantes dans les sections efficaces de réactions.

Plusieurs expériences réalisées ces dernières années ont permis de mettre en évidence l'effondrement progressif de la couche magique $N = 28$ pour les noyaux de plus en plus éloignés de la vallée de la stabilité [1-3].

L'émergence récente de faisceaux radioactifs intenses permet dorénavant d'élargir l'étude expérimentale aux noyaux de plus en plus éloignés de la vallée de stabilité. Ces installations favorisent l'exploration de régions de la carte des noyaux peu étudiées. Le cas particulier de l'état isomère du ^{43}S ($Z = 16, N = 27$), un noyau radioactif ayant 7 neutrons de plus que le dernier soufre stable, a été étudié au GANIL à Caen (France) [3] et au RIKEN Nishina Center proche de Tokyo (Japon) [4]. Cet isotope possède un premier état excité isomère. La mesure du moment magnétique

dipolaire montre que cet état isomère possède les caractéristiques de ce qui devrait être l'état fondamental, si le nombre magique $N = 28$ était persistant. Cette observation indique que l'état fondamental du noyau de ^{43}S est un état intrus provenant d'une orbitale nucléaire naturellement localisée au dessus du nombre magique $N = 28$ (figure 2).

Les noyaux possédant un nombre magique de nucléons (proton ou neutron) sont attendus comme ayant une forme sphérique. Or, pour le ^{43}S , l'état fondamental étant un état intrus, il est prédit avec une déformation allongée importante,

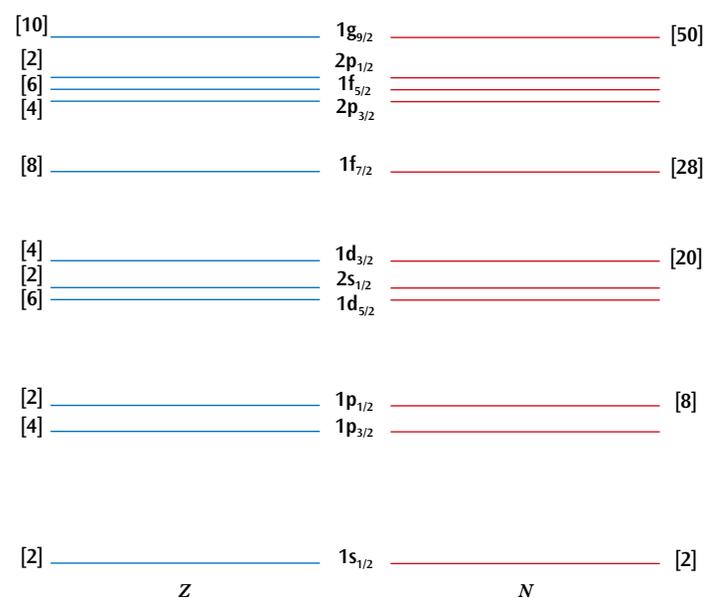


Figure 1. Séquence des orbitales nucléaires. Sont représentés entre parenthèses le nombre de nucléons (proton Z et neutron N) occupant l'orbitale considérée et, entre crochets, les nombres magiques.

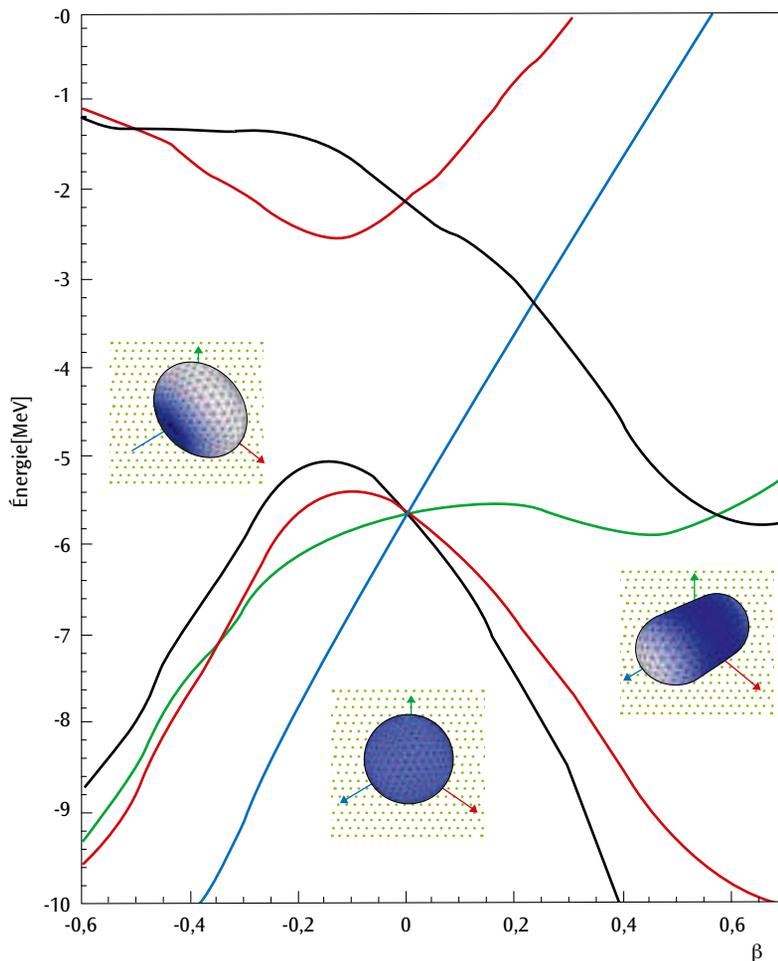


Figure 2. Calcul de type champ moyen décrivant l'évolution des énergies des orbitales individuelles neutrons en fonction du paramètre de déformation axiale β .

et l'état isomère est attendu pour être sphérique. La mesure de sa distribution de charge, moment quadripolaire électrique $|Q_s| = 23(3) \text{ efm}^2$, montre que cet état isomère est assez éloigné de la valeur attendue pour un état sphérique $Q \approx 4 \text{ efm}^2$ pour des noyaux autour de $N = 28$. Cette différence s'explique par le fait que la fonction d'onde de l'état isomère n'est pas pure, mais composée d'un mélange de configurations décrivant l'état sphérique et l'état intrus. Ceci implique que cet état isomère s'éloigne légèrement de la forme sphérique. Ces résultats sont bien reproduits par les modèles théoriques [5,6].

L'étude réalisée sur l'état isomère du noyau de ^{43}S a montré qu'au voisinage de $N = 28$ la structure nucléaire est très différente de ce qu'elle est pour les noyaux stables. Une coexistence de forme entre l'état fondamental et le premier état excité isomère a été mise en évidence. Ces deux états coexistent à basse énergie d'excitation avec une déformation allongée pour l'état fondamental et un état isomère proche de la sphéricité.

En conclusion, la couche $N = 28$ n'est plus une couche magique pour les noyaux éloignés de la vallée

de la stabilité. Les résultats obtenus ont permis de valider les prédictions des modèles théoriques pour cette région.

Références

- [1] B. BASTIN *et al.*, "Collapse of the $N = 28$ Shell Closure in ^{42}Si ", *Phys. Rev. Lett.*, **99**, 022503 (1997).
- [2] D. SANTIAGO-GONZALEZ *et al.*, "Triple configuration coexistence in ^{44}S ", *Phys. Rev. C*, **83**, 061305 (2011).
- [3] L. GAUDEFROY *et al.*, "Shell Erosion and Shape Coexistence in $^{43}_{16}\text{S}_{27}$ ", *Phys. Rev. Lett.*, **102**, 092501 (2009).
- [4] R. CHEVRIER *et al.*, "Is the $7/2^-_1$ Isomer State of ^{43}S Spherical?", *Phys. Rev. Lett.*, **108**, 162501 (2012).
- [5] S. PÉRU, M. GIROD, J.-F. BERGER, "Evolution of the $N = 20$ and $N = 28$ Shell Closures in Neutron-Rich Nuclei", *Eur. Phys. J. A*, **9**, p. 35-47 (2000).
- [6] L. GAUDEFROY, "Shell model study of $N \approx 28$ neutron-rich nuclei", *Phys. Rev. C*, **81**, 064329 (2010).

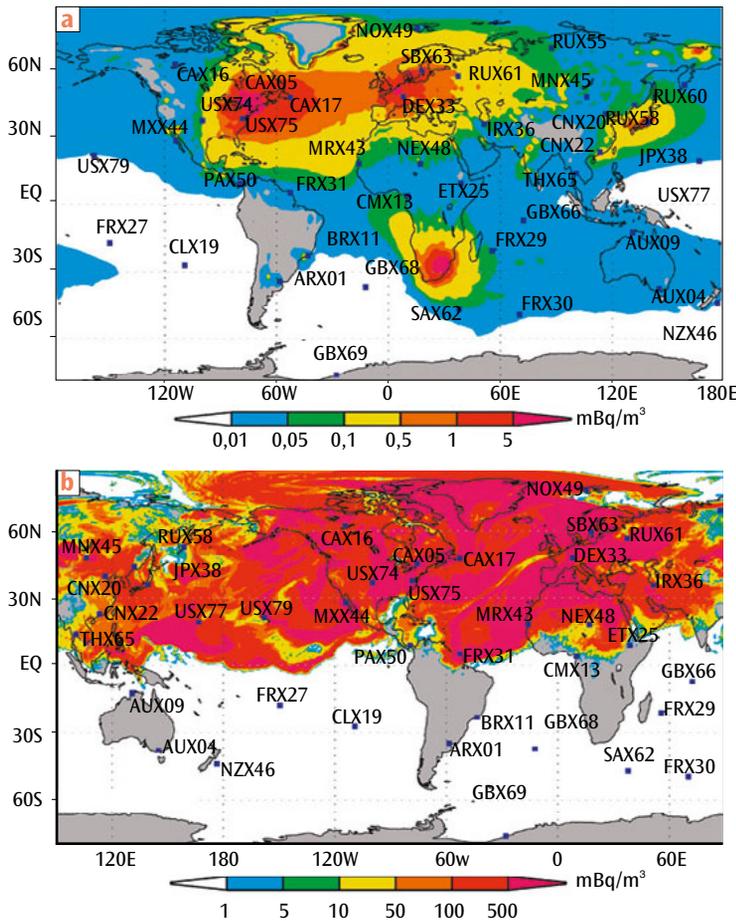


Figure 2. (a) : bruit de fond simulé global en xénon-133 dû aux rejets atmosphériques des principales usines de production d'isotopes médicaux et des centres nucléaires de production d'électricité (CNPE) ; situation prévalant avant l'incidence de l'accident de Fukushima (la localisation de l'ensemble des stations de surveillance gaz rares de l'Otice est indiquée sur la carte). (b) : activités volumiques atmosphériques en xénon-133, trois semaines après l'accident de Fukushima. L'ensemble de l'hémisphère Nord est atteint par les rejets survenus entre le 11 et le 23 mars 2011.

tils ou semi-volatils, la présence dans l'atmosphère d'éléments peu volatils, ^{95}Nb et ^{103}Ru , sous forme de traces (activités volumiques, respectivement de $3,0 \cdot 10^{-4}$ et $5,0 \cdot 10^{-5} \text{ Bq/m}^3$).

En s'appuyant sur les travaux issus des programmes de simulation d'accidents graves de réacteurs (VERCORS, PHEBUS) conduits par le CEA (Direction de l'énergie nucléaire) et par l'Institut de radioprotection et de sûreté nucléaire (IRSN), les concentrations en produits de fission mesurées par spectrométrie d'émission gamma par le DASE, permettent de conclure à un état de fusion avancée des cœurs des réacteurs comme origine des rejets de produits de fission à l'atmosphère [1,2], et d'invalider le dénoyautage de la piscine de stockage de l'unité 4 (548 assemblages de haute activité étaient en cours de refroidissement durant les trois mois précédant l'accident). En effet, le rapport $^{131}\text{I}/^{137}\text{Cs}$, mesuré dans les prélèvements atmosphériques, se révèle consistant avec celui correspondant à l'inventaire des cœurs des réacteurs de Fukushima au moment de leurs arrêts. Par ailleurs, la mise en évidence d'une faible signature ^{113}Sn ($4,7 \cdot 10^{-5} \text{ Bq/m}^3$) dans l'air, produit

d'activation formé par la réaction $^{112}\text{Sn}(n,\gamma)^{113}\text{Sn}$ au sein des gaines de combustible (constitué d'un alliage en Zircalloy composé principalement de zirconium associé à 1,5 % d'étain), implique une température minimale de $1\ 800^\circ\text{C}$ correspondant à la fusion des gaines. La non-détection de ^{95}Zr , usuellement en filiation radioactive avec le ^{95}Nb , dans les prélèvements liés à l'accident de Fukushima, est conforme aux résultats obtenus par les expériences CEA/IRSN qui ont montré que cet élément réfractaire était très peu relâché, même dans le cas d'un cœur de réacteur très dégradé.

Une autre évidence de l'état de dégradation des réacteurs de la centrale de Fukushima est apportée par la détection des isotopes radioactifs du xénon (^{133}Xe et $^{131\text{m}}\text{Xe}$) par les stations de surveillance gaz rares de l'Otice localisées dans l'hémisphère Nord. Des simulations du transport atmosphérique restituant les activités volumiques mesurées aux stations [3], conduisent à estimer que 80 % du xénon radioactif correspondant à l'inventaire des cœurs de réacteurs est relâché dans l'atmosphère par les différents rejets. Ces travaux permettent aussi d'évaluer la chronologie des rejets et d'estimer les niveaux de radioactivité émis dans l'atmosphère. Ils suggèrent que les principales émissions atmosphériques ont eu lieu le 14 mars 2011 (explosion du réacteur n° 2) et qu'aucun rejet majeur n'a eu lieu après le 23 mars. En accord avec les observations des stations du réseau international de surveillance de l'Otice, les simulations montrent que l'Europe est atteinte dans les deux semaines qui suivent le tsunami, et qu'en moins de trois semaines la totalité de l'hémisphère Nord est affectée (figure 2). Les termes sources déterminés pour l'iode-131 et le césium-137 montrent que les rejets atmosphériques totaux consécutifs de l'accident de Fukushima Dai-ichi pourraient représenter environ 10 % de ceux issus de l'accident de Tchernobyl. Compte tenu des faibles niveaux d'activité détectés en France et en Europe, l'impact radiologique, sur la population de ces pays, de l'accident survenu à la centrale nucléaire de Fukushima est négligeable.

Références

- [1] G. LE PETIT *et al.*, "Analysis of radionuclide releases from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident Part I", *Pure Appl. Geophys.*, doi 10.1007/s00024-012-0581-6 (2012).
- [2] G. DUCROS *et al.*, "Main lessons learnt from fission product release analysis for the understanding of Fukushima Dai-ichi NPP understanding status", *Proc. conference 2012 ANS Winter Meeting and Nuclear Technology Expo*, San Diego (CA, USA), November 11-15, 2012.
- [3] P. ACHIM *et al.*, "Analysis of radionuclide releases from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident Part II", *Pure Appl. Geophys.*, doi 10.1007/s00024-012-0578-1 (2012).

Analyse du phénomène de striction en régime dynamique par stéréocorrélation

G. BESNARD - J.-M. LAGRANGE / CEA-DAM Île-de-France

F. HILD - S. ROUX / Laboratoire de mécanique et technologie, ENS Cachan / CNRS / UPMC, UniverSud Paris, Cachan

P. MARTINUZZI / CEA - Valduc

La compréhension physique des mécanismes de ruine, telle que la striction, 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'éprouvettes cylindriques en aluminium de différentes longueurs soumises à une sollicitation de traction rapide au moyen de barres de Hopkinson. Afin de caractériser le comportement des éprouvettes, un système d'imagerie numérique rapide est mis en oeuvre. 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'acquisition stéréoscopique. Nous insistons sur les spécificités liées à la haute cadence des prises de vue et aux grandes déformations des objets analysés ce qui, dans le contexte de notre étude, nécessite l'emploi de techniques de dépouillement d'images complémentaires.

Pour les applications de dynamique rapide où les objets subissent de grandes déformations (parfois au-delà de 100 %) pendant des temps très courts (moins de 1 ms), la cinématographie rapide est un moyen incontournable. Dans ce contexte, la mise en place d'un système stéréoscopique permet 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]. Nous nous concentrons sur leur déclinaison à des expériences de traction rapide en analysant, plus particulièrement, 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 sous barres de Hopkinson

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 de la durée de l'expérimentation de quelques millisecondes, la cadence d'acquisition doit être de l'ordre de 50 000 images par seconde. La solution retenue est d'utiliser deux caméras rapides (Photron APX-RS). Or, pour ces vitesses d'enregistrement, la résolution des images est faible et est à mettre en relation avec les forts niveaux de déformation atteints en cours d'expérience. Les associations spatiales et temporelles s'enrichissent, par conséquent, de corrections préalables.

L'accès à des informations 3D est basé sur l'analyse de paires d'images bidimensionnelles et nécessite une incontournable étape d'étalonnage stéréoscopique.

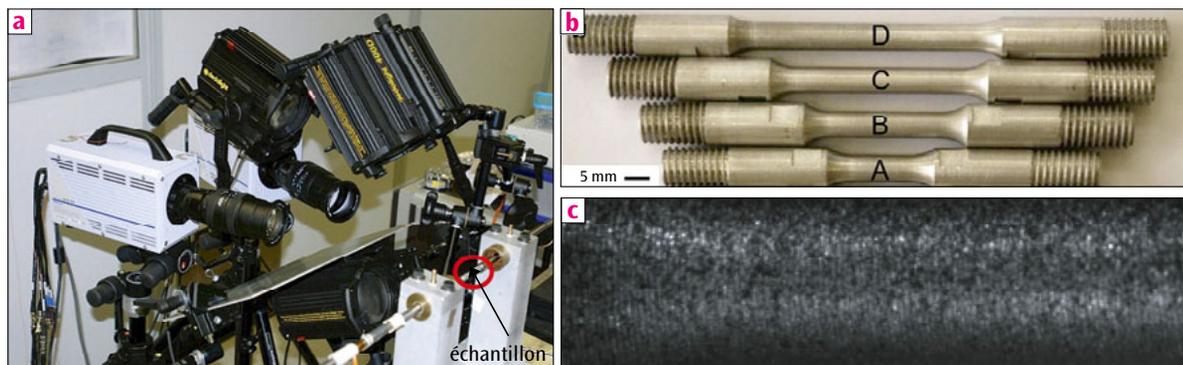


Figure 1.
(a) Mise en oeuvre expérimentale de la visée stéréoscopique.
(b) : Géométries des différentes éprouvettes cylindriques testées et zoom du mouchetis (c).

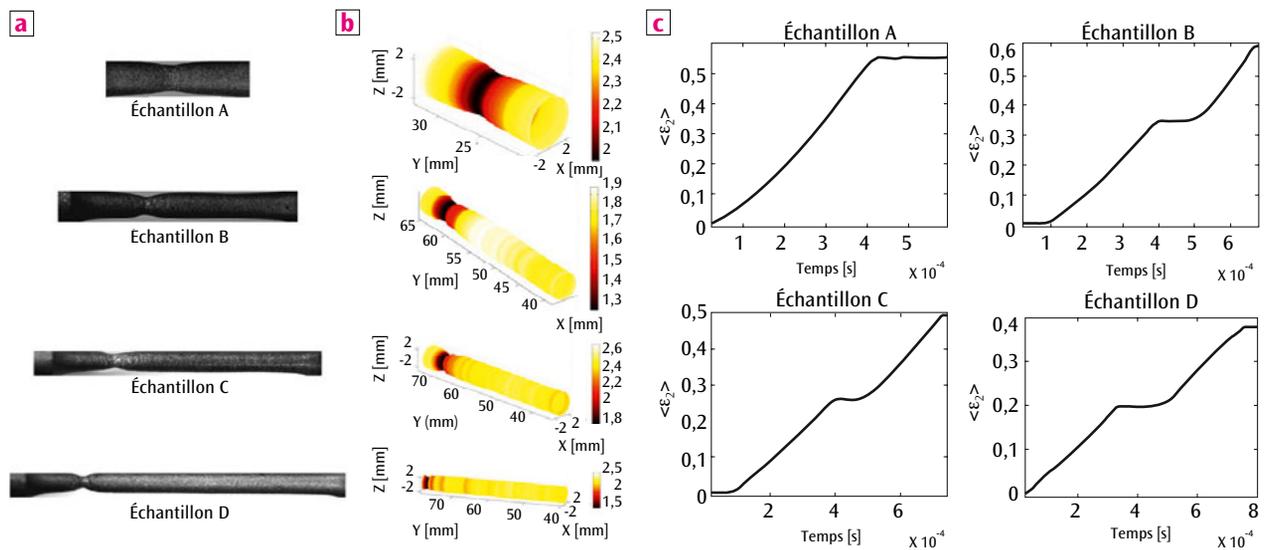


Figure 2. Observation de la striction des éprouvettes (a) et reconstruction 3D correspondante (b). (c) : Courbes traçant l'évolution de la déformation moyenne en fonction du temps pour les 4 géométries cylindriques.

Ceci conduit à la mise en place de mires calibrées en forme de livre ouvert [2] dont les surfaces représentent un damier fortement contrasté où chaque intersection est précisément connue.

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 [2] dont les performances sont intimement liées au marquage initial réalisé sur la surface de l'objet, ce marquage étant obtenu par mouchetis de peinture (figure 1c).

La présence de grands déplacements 3D ainsi que la forme de l'objet impliquent des mouvements importants d'amplitude sur les images enregistrées qui perturbent l'emploi de techniques basées sur la corrélation, malgré les stratégies multi-échelles qu'elles incorporent [2,3]. Une phase de prétraitement a été développée de manière à stabiliser la séquence en anticipant au mieux l'expansion apparente de l'objet, et en incluant sa forme théorique (dans le cas d'éprouvettes cylindriques). Cette phase consiste en des calculs grossiers de corrélation à référence variable couplés à une détection de contour de l'objet pour l'association temporelle. Pour l'association spatiale, la connaissance théorique de la forme est utilisée afin d'améliorer cette étape [4]. Ces estimations préliminaires donnent accès à un déplacement moyen permettant une initialisation du second calcul de corrélation beaucoup plus fin et à référence fixe (pas de cumul d'erreurs).

Tous les points précédents étant maîtrisés, la reconstruction 3D de la surface en découle pour différentes tailles d'éprouvettes testées (figure 2). De ces reconstructions, l'évolution des déformations principales sont déduites et servent de base pour la caractérisation du temps d'apparition de la striction mécanique.

L'estimation des incertitudes, pour les différents postes de dégradation des mesures expérimentales, est ensuite menée par propagation d'erreurs. Cette donnée 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 ultrarapide 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 très 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, *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).
- [3] G. BESNARD *et al.*, "Characterization of Necking Phenomena in High-Speed Experiments by Using a Single Camera", *EURASIP J. Im. Video Proc.*, Vol. 2010, ID 215956 (2010).
- [4] G. BESNARD, F. HILD, J.-M. LAGRANGE, P. MARTINUZZI, S. ROUX, "Analysis of necking in high speed experiments by stereocorrelation", *Int. J. Impact Eng.*, **49**, p. 179-191 (2012).
- [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 September 2010.

Suivi submillimétrique de réflecteurs radar

I G. QUIN - PH. LOREAUX / CEA-DAM Île-de-France

Nous présentons les résultats d'une expérience menée à l'aide de réflecteurs radar bidirectionnels nommés MUSE (Multipass Scattering Equipment). Ces réflecteurs, développés et brevetés par le CEA, permettent des mesures de déplacements du sol en 3D à l'aide d'images satellites radar. En effet, si l'on dispose de plusieurs images radar de ces réflecteurs acquises à des dates différentes, il est possible de mesurer précisément leurs déplacements au cours du temps par interférométrie. Le but de notre expérience est l'évaluation de la précision de cette mesure. Elle consiste à disposer des réflecteurs sur un site stable et à leur imposer manuellement des déplacements connus de quelques millimètres entre chaque acquisition à l'aide de verniers micrométriques. Les déplacements des réflecteurs sont ensuite calculés à l'aide de l'outil de traitement d'images radar du CEA, appelé CIAO (chaîne interférométrique radar opérationnelle). Nous montrons qu'il est possible de mesurer leurs déplacements avec une précision de 0,48 mm.

Les satellites radar évoluent en orbite polaire autour de la Terre et forment des images par émission de leur propre onde électromagnétique, suivie de la réception des échos réfléchis par le sol. Des images peuvent ainsi être acquises de jour comme de nuit, et quelque soit le couvert nuageux. La longueur d'onde radar varie entre 3 et 20 cm selon le satellite. Les images radar sont formées de pixels complexes dont l'amplitude correspond à la puissance du signal réfléchi et où la phase est liée au temps d'aller-retour de l'onde entre le satellite et le sol. Ces images peuvent être utilisées, entre autres, pour mesurer une déformation du sol suite à un séisme en utilisant la technique d'interférométrie. Pour ce faire, la comparaison d'un couple d'images acquises avant et après l'évènement est utilisée pour mesurer la déformation du sol. Cette donnée associée à la cartographie de la déformation permet alors de déduire des informations sur la nature du séisme et déterminer, par exemple, les failles mises en jeu. L'interférométrie radar est cependant limitée par certains phénomènes naturels qui gênent la mesure de déformation dans certaines zones, ou lorsque les images sont acquises à des dates trop éloignées. La solution est alors l'implantation de réflecteurs radar artificiels qui permettent des mesures fiables et précises sur de longues durées.

Le réflecteur MUSE

Les réflecteurs radar développés et brevetés par le CEA (Multipass Scattering Equipment, MUSE) sont des objets métalliques en forme de doubles coins de cube capables de réfléchir les ondes radar vers le satellite émetteur. L'innovation proposée consiste à pouvoir utiliser le réflecteur MUSE (figure 1) quelque

soit le satellite radar et quelque soit le mode de prise de vue du satellite (angle d'incidence, passe ascendante ou descendante). Les capteurs radar modernes permettant d'acquérir une image tous les jours, il est ainsi possible d'établir un suivi régulier d'un site. La mesure de déformation sur des cibles telles que des réflecteurs radar à l'aide d'images acquises régulièrement, utilise une variante de l'interférométrie radar classique. On parle alors de mesure sur réflecteurs permanents (en anglais *Permanent Scatterers*, PS). Ces PS sont des pixels dans les images aux propriétés temporelles stables et fiables. Il existe des PS naturels, le plus souvent en zones urbaines, contenant des structures géométriques capables de réfléchir les ondes radar vers le satellite. Hors des zones urbaines, les PS naturels sont rares et des réflecteurs radar artificiels comme MUSE peuvent être mis en place pour



Figure 1. Dispositif expérimental montrant les réflecteurs MUSE sur leurs platines mobiles.

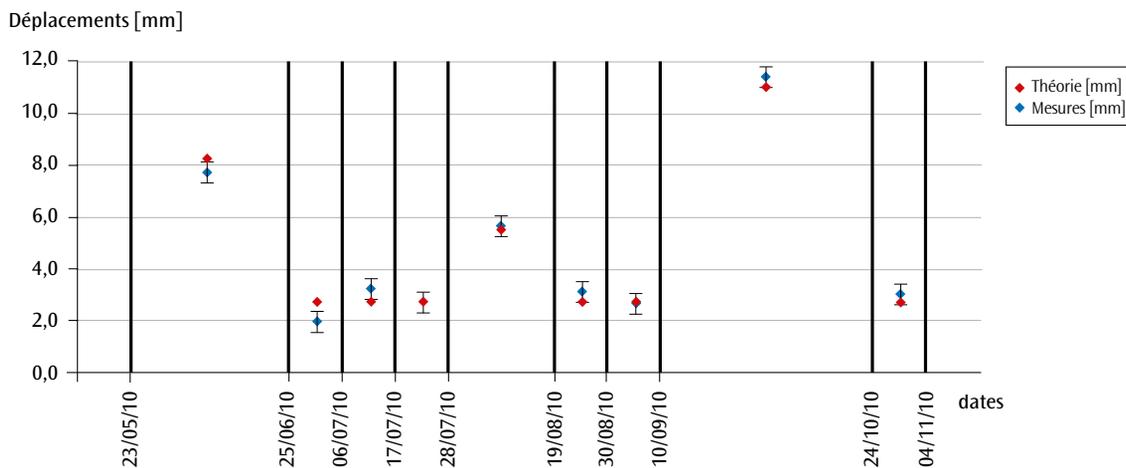


Figure 2. Déplacements d'un des réflecteurs MUSE, mesurés à partir des 10 images radar par CIAO, comparés aux données terrain.

densifier les points de mesure. Afin d'estimer la précision des mesures de déplacements des réflecteurs MUSE à l'aide de la chaîne de traitement d'images radar du CEA (CIAO), nous avons mis en place une expérience à partir de déplacements connus.

Protocole expérimental

Pour l'expérience, trois réflecteurs MUSE ont été montés sur des platines munies de verniers micrométriques permettant de contrôler finement leurs déplacements au cours de l'acquisition d'une série temporelle de 10 images acquises par le satellite allemand TerraSAR-X. Un quatrième réflecteur fixe sert de référence pour les trois autres. Le dispositif expérimental est présenté sur la **figure 1**. Cette expérience est la première à utiliser un dispositif aussi précis pour contrôler le mouvement de réflecteurs. Entre chaque image, les déplacements imposés aux réflecteurs sont de l'ordre de quelques millimètres, de sorte à simuler une vitesse de déplacement constante au cours du temps.

Résultats

Les mesures de déplacements d'un des réflecteurs par rapport au réflecteur fixe sont représentées sur la **figure 2**, où elles sont comparées aux déplacements théoriques imposés. Nous constatons un très bon accord entre les mesures et les données terrain. La précision accessible évaluée sur l'ensemble des réflecteurs mobiles est de 0,48 mm. Les vitesses de déplacements de chacun des réflecteurs ont égale-

ment pu être évaluées par CIAO avec une précision de 0,4 mm/an. De plus, ces performances sont en accord avec les simulations effectuées lors de la définition du protocole expérimental [1,2].

Conclusion

Nous avons montré que nous pouvions suivre les déplacements des réflecteurs MUSE avec une précision submillimétrique de 0,48 mm à l'aide de CIAO, aussi bien que leurs vitesses moyennes avec une précision de 0,4 mm/an.

Nous travaillons actuellement sur le développement d'un radôme de protection pour le réflecteur, qui devra permettre son utilisation dans diverses conditions climatiques sans dégrader la précision des mesures.

Références

- [1] G. QUIN, PH. LOREAU, "Submillimeter Accuracy of Multipass Corner Reflector Monitoring by PS Technique", *IEEE T. Geosci. Remote*, **51**(3), p. 1775-1783 (2013). doi: 10.1109/TGRS.2012.2206600.
- [2] PH. LOREAU, G. QUIN, "Passive electromagnetic wave reflector for measuring local strain in a structure on the earth surface", brevet WO/2012/101072 (2012).

Caractérisation du spectre en neutrons du réacteur Caliban par dosimétrie à activation

■ X. JACQUET - P. CASOLI - N. AUTHIER - G. ROUSSEAU - C. BARSU / CEA – Valduc

Caliban est un réacteur à cœur métallique en uranium hautement enrichi, exploité sur le centre CEA de Valduc, notamment pour des études de durcissement électronique. Aussi, il est nécessaire de caractériser au mieux le spectre des neutrons produits au sein de sa cavité d'irradiation. Des mesures ont été réalisées par le passé et aussi plus récemment pour l'étude de ce spectre. Un ensemble de dosimètres à activation et de chambres à fission adapté au spectre du réacteur a été sélectionné. Les mesures ont été comparées à des résultats de calculs obtenus avec le logiciel de déconvolution UMG et avec le code d'activation FISPACT. Les résultats des simulations sont en bon accord avec les mesures pour la plupart des détecteurs. Le logiciel UMG a également été mis en oeuvre pour effectuer la reconstruction du spectre de neutrons à partir d'un spectre d'entrée calculé avec le code de transport de particules TRIPOLI-4 et en utilisant le modèle du réacteur publié en tant que benchmark.

Les installations expérimentales du centre CEA de Valduc sont des outils uniques en Europe pour effectuer des irradiations dans des champs mixtes de neutrons et de rayonnement gamma. Parmi elles, les deux réacteurs à cœur métallique, Caliban et Prospero, ont été conçus pour la réalisation d'études de neutronique, de criticité et de durcissement électronique.

Le spectre en neutrons du réacteur Caliban a été étudié par le passé par le biais de mesures d'activation et de simulations. Ces mesures ont été complétées et interprétées récemment à l'aide d'outils logiciels permettant de progresser dans la connaissance du spectre, en prenant notamment en compte les corrélations existant entre les dosimètres et en associant des incertitudes aux fluences évaluées [1].

Le réacteur Caliban

Caliban est un réacteur métallique cylindrique (figure 1) de petite dimension (diamètre de 19,5 cm et hauteur de 25 cm). Il est constitué d'un alliage de molybdène et d'uranium hautement enrichi en uranium-235. Quatre barres de contrôle constituées du même alliage permettent de le piloter selon deux modes: stationnaire ou pulsé. Un laboratoire de dosimétrie est dédié aux expériences sur le réacteur: il dispose notamment de spectromètres gamma et X permettant des mesures à bas bruit de fond.

Les outils de simulation utilisés

Une description de Caliban a été publiée sous forme de benchmark [2], comportant notamment une modélisation détaillée du réacteur sous les codes de transport de particules TRIPOLI-4 et MCNP.

Le logiciel FISPACT [3] développé par l'UKAEA (Royaume-Uni) est un code de calcul d'activation

permettant de traiter les réactions induites par neutrons.

Le logiciel UMG [4,5] développé par le PTB (Allemagne) est constitué de deux codes, Maxed et Gravel, permettant de produire une estimation d'un spectre neutron à partir d'un ensemble de mesures d'activation et d'un spectre d'entrée. Maxed recherche le spectre correspondant au maximum d'entropie du système, en tenant compte des contraintes imposées par les mesures. Gravel applique une méthode des moindres carrés itérative, utilisant un algorithme de type SAND-II modifié [6].

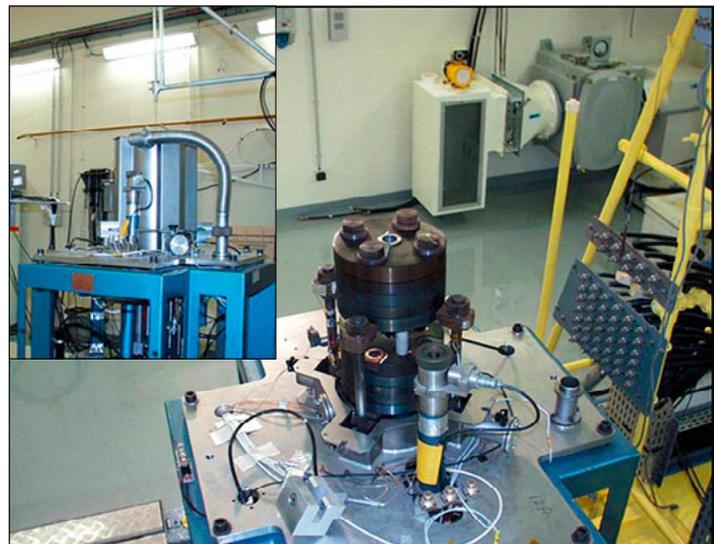


Figure 1. Vue du réacteur Caliban non capoté; en médaillon, muni de son capot.

Comparaisons expériences-calculs

Les mesures ont été réalisées dans la cavité du réacteur, en mode stationnaire ou en mode pulsé, pour quatorze réactions d'activation et cinq réactions sur chambres à fission (figure 2). La normalisation par rapport à la puissance du réacteur a été réalisée à l'aide de différents moniteurs: chambres à fission, dosimètres indium et photomultiplicateurs.

Des calculs d'activation réalisés à l'aide des logiciels TRIPOLI-4 et FISPACT ont été comparés aux résultats expérimentaux. Les écarts calculs-mesures et les écarts entre les deux codes restent faibles (< 10 %) pour la plupart des réactions d'activation, les écarts plus importants s'expliquant par l'utilisation de bibliothèques de données nucléaires (EAF2007 et IRDF2002) et de méthodes de calculs différentes entre les deux codes.

Les codes Maxed et Gravel ont été mis en oeuvre pour reconstruire le spectre en cavité de Caliban à partir des mesures de dosimètres à activation et de chambres à fission. En utilisant un spectre d'entrée calculé avec TRIPOLI-4, la convergence est bonne pour les deux codes. En revanche, si un spectre plat est utilisé en entrée, seul Gravel converge convenablement.

Le spectre évalué à l'aide de ces mesures et des calculs de reconstruction associés ont été utilisés pour obtenir une estimation réactualisée des paramètres intégraux du spectre en cavité, tels que la fluence totale, la fluence équivalente à 1 MeV dans le silicium, qui sont notamment des grandeurs d'intérêt pour les études de durcissement électronique.



Figure 2. Exemple de chambres à fission et de cibles d'activation utilisées pour la caractérisation du spectre en neutrons.

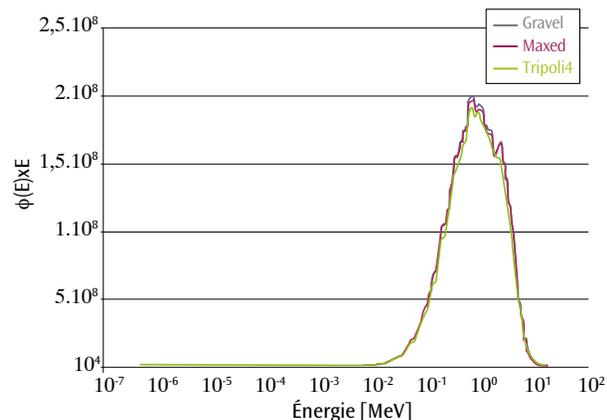


Figure 3. Spectre en neutrons dans la cavité du réacteur Caliban : reconstruction avec Gravel et Maxed à partir d'un spectre calculé avec le code TRIPOLI-4.

Conclusion

Le présent travail a permis de montrer l'efficacité du logiciel UMG pour reconstruire le spectre neutronique en cavité du réacteur Caliban, à partir de mesures réalisées avec des dosimètres à activation et des chambres à fission. Cette étude contribue à améliorer la connaissance du spectre produit et permet donc une meilleure interprétation des différentes expériences réalisées auprès du réacteur.

Actuellement de nouvelles mesures sont envisagées et de nouveaux outils logiciels étudiés pour progresser encore dans ce domaine. Il s'agit notamment de pouvoir tenir compte des incertitudes associées aux mesures et aux données nucléaires utilisées dans les codes.

Remerciements

Les auteurs remercient l'équipe d'exploitation du réacteur Caliban, MM. Y. Leo, D. Chanussot, H. Lereuil, G. Gevrey et Mme F. Guilbert, ainsi que M. P. Grivot pour son aide et ses conseils concernant ce travail.

Références

- [1] X. JACQUET, P. CASOLI, N. AUTHIER, G. ROUSSEAU, C. BARSU, "New Measurements and the Associated Unfolding Methodologies to Characterize the Caliban Pulsed Reactor Cavity Neutron Spectrum by the Foil Activation Method", *J. ASTM Int.*, **9**(3), p. 1-15 (2012).
- [2] N. AUTHIER, B. MECHITOUA, *Bare highly enriched uranium fast burst reactor Caliban*, International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, NEA Nuclear Science Committee (2007).
- [3] R. A. FORREST, *FISPACT-2007: User manual*, Easy Documentation series, UKAEA FUS 534, Euratom/UKAEA Fusion Association (2007).
- [4] UMG 3.3, *Analysis of Data Measured with Spectrometers using Unfolding Techniques*, PTB (2004).
- [5] M. REGINATTO, *The 'Few Channel' Unfolding Programs in the UMG Package UMG Software Instructions*, Physikalisch-Technische Bundesanstalt Eds, Braunschweig, Germany (2004).
- [6] SAND-II, Programme disponible dans la base de données de l'Agence pour l'énergie nucléaire, www.oecd.nea.org.

Interaction élastique de nanoparticules

X. DIEUDONNÉ - H. PIOMBINI - K. VALLÉ - P. BELLEVILLE / CEA – Le Ripault

A. AYOUCHE - G. VAUDEL, V. GUSEV - P. RUELLO / Institut des molécules et de matériaux du Mans (IMMM),

UMR CNRS n°6283, Université du Maine, Le Mans

Les propriétés physiques et chimiques des films colloïdaux, systèmes constitués de nanoparticules (NP) interconnectées en surface, dépendent de la fraction volumique des NP, de leurs propriétés intrinsèques et de la nature de leurs interconnexions. Les voies chimiques pour l'élaboration de ces nanocomposites sont diverses (précurseurs, solvants...) et engendrent différents types de contacts entre NP. La nature des liaisons chimiques au niveau des nanocontacts peut être établie par spectroscopie, mais cette technique ne permet pas de caractériser la cohésion/élasticité du solide qui est directement liée à la rigidité des nanoconnexions entre les NP. Nous utilisons ici une technique basée sur la génération et la détection par laser femtoseconde d'une onde acoustique à l'échelle nanométrique pour évaluer la rigidité des contacts entre NP. Nos mesures ont permis de mesurer la vitesse acoustique dans les matériaux étudiés et d'en déduire les modules élastiques et coefficients de rigidité des nanocontacts.

Résultats expérimentaux

Afin de montrer l'influence de la nature des liaisons entre NP sur l'élasticité d'une assemblée de nanoparticules, les mesures ont été réalisées sur différents types d'échantillons [1]. Les systèmes étudiés sont des films colloïdaux d'environ 200 nm d'épaisseur déposés par trempage-retrait (*dip-coating*) sur du silicium recouvert d'une couche de platine. Les NP qui les constituent ont un diamètre de 10 nm et sont interconnectées soit par des liaisons de type Van der Waals (VdW) (échantillons 1 et 2), soit par des liaisons hydrogène ou covalente (H/C) (échantillons 3 et 4). La transformation des groupements chimiques liés par des liaisons VdW en H/C, déjà démontrée, est réalisée selon deux procédés notés 1 et 2. L'indice et l'épaisseur des films sont évalués par ellipsométrie. Trois échantillons de « référence » ont également été testés, l'un constitué de silice polymérique (échantillon 5), un second (échantillon 6) réalisé par PVD (*Physical Vapor Deposition*), et le troisième d'une couche de platine déposée sur silicium (échantillon 7). Toutes leurs caractéristiques sont récapitulées dans le **tableau 1**.

Le principe de la technique, dite d'acoustique picoseconde, que nous avons utilisée pour cette étude est décrit sur la **figure 1**. L'impulsion laser pompe génère une impulsion acoustique dans le film de platine qui est transmise dans le film colloïdal. La résonance mécanique du film module dans le temps la réflectivité optique R du matériau qui est mesurée grâce au faisceau sonde issu du même laser. La **figure 2** présente les spectres

des évolutions de $R(t)$, donnant les modes de résonance fondamentaux f_0 et les premiers harmoniques f_1 . Ces fréquences vérifient :

$$f_n = (2n + 1) \frac{V_{LA}}{4H} \text{ où } n=0,1,\dots$$

H est l'épaisseur du film et V_{LA} est la vitesse acoustique longitudinale.

La détermination des fréquences propres permet de déterminer V_{LA} (**tableau 1**) et d'évaluer le module élastique $M = \rho V_{LA}^2$, connaissant la densité ρ calculée à partir des indices (n) mesurés. Le module de l'échantillon de référence $M_6 = M_{SiO_2-PVD}$ est en accord avec la littérature [2], M_5 est quant à lui plus petit, car plus poreux, et les autres M_i sont plus faibles que la celui de silice fondue ($M = 78$ GPa). Le décalage vers les hautes fréquences des modes élastiques des solides colloïdaux montre bien l'augmentation de l'élasticité lors du passage de nanocontacts VdW à covalents.

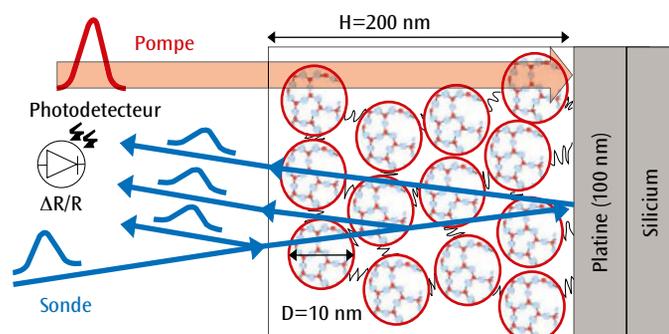


Figure 1. Principe de l'expérience pompe-sonde.

N° échantillon	Nature	Caractéristiques optiques			Fréquences propres		Vitesse du son	Module élastique	Rigidité effective du contact NP	Rigidité effective du surface NP
		H±2nm	n±0,01	porosité P	f ₀ (GHz)	f ₁ (GHz)				
Paramètre mesuré		H±2nm	n±0,01	porosité P	f ₀ (GHz)	f ₁ (GHz)	V _{LA} (err. 5%)	M	K _{eff}	γ/2
Unité		nm		%	GHz	GHz	m/s	GPa		J/m ³
1	SiO ₂ NP(VDW) film natif	191	1,21	55	1,5	4,6	1159	1,3	34	0,0017
2	SiO ₂ NP(VDW) film natif	210	1,21	55	1,7	5,1	1428	2,0	51	0,006
3	SiO ₂ NP(H/V) procédé 1	194	1,22	54	2,6	7,7	2005	4,0	100	0,046
4	SiO ₂ NP(H/V) procédé 2	210	1,21	55	2,2	6,4	1820	3,2	83	0,026
5	SiO ₂ Polymérique	176	1,4	12,7	5,4	17	3970	30,3		
6	SiO ₂ -PVD	200	1,45	1,4	6,7	20,1	5360	63		
7	Pt/Si	100								

Tableau 1 : Caractéristiques des nanoparticules et des films.

Discussion

Les théories de l'élasticité des assemblages granulaires prédisent les dépendances des constantes de Lamé λ et μ sur les rigidités normale k_n et transverse k_s des contacts :

$$\lambda = \frac{z \cdot \varphi}{5 \cdot \pi \cdot d} (k_n - k_s) \quad \mu = \frac{z \cdot \varphi}{10 \cdot \pi \cdot d} (2 \cdot k_n + 3 \cdot k_s)$$

où z est le nombre de contacts moyen entre nanoparticules, φ la fraction volumique solide et d le diamètre des particules. Comme $M = \lambda + 2\mu$ et $\rho = \varphi \cdot m / (\pi \cdot d^3/6)$ (m est la masse individuelle des NP), on a :

$$V_{LA} = \sqrt{\frac{M}{\rho}} = d \sqrt{\frac{z}{10} \left(\frac{k_n + (2/3)k_s}{m} \right)}$$

z peut être estimé à partir de la connaissance de la densité. Ici nous avons $z = 4,6$. Ainsi, des mesures des modules M , nous déduisons le coefficient élastique effectif des nanocontacts $k_{eff} = k_n + 2/3k_s$, donné dans le **tableau 1**. Les valeurs obtenues sont en accord avec la nature chimique des contacts. Pour avoir l'énergie d'interface, nous employons ensuite le modèle de Derjaguin-Muller-Toporov [3] qui exprime P , la force appliquée au contact, à partir du module d'élasticité K des sphères en contact, du rayon effectif r et de l'énergie d'interface γ : $P = K a^3/r - 2\pi r \gamma$, où a est le rayon de la surface de contact. En considérant qu'à l'équilibre la force entre deux NP est nulle ($P = 0$) et que $k_n = dP/d\delta$ (δ étant l'enfoncement $\delta = a^2/r$), nous obtenons que la rigidité effective de contact normale k_n vaut $k_n = 3Ka$. Connaissant k_{eff} , et utilisant la relation $k_s = [2(1 - \nu)/(2 - \nu)] \cdot k_n$, nous pouvons alors estimer le rayon de contact et donc déterminer l'énergie de surface des nanocontacts. Les $\gamma/2$ (les énergies de surface) trouvées sont reportées dans le **tableau 1**.

Conclusion

L'étude sur l'élasticité de l'assemblage des NP par des techniques opto-acoustiques ultrarapides donne des informations sur la rigidité des contacts

interparticulaires et sur l'énergie de surface des NP via des mesures de vitesse acoustique. Grâce à une chimie des NP contrôlée et caractérisée (VdW versus liaison H/C), nous mettons clairement en évidence le rôle clé de la physico-chimie des nanocontacts sur les propriétés élastiques de films colloïdaux.

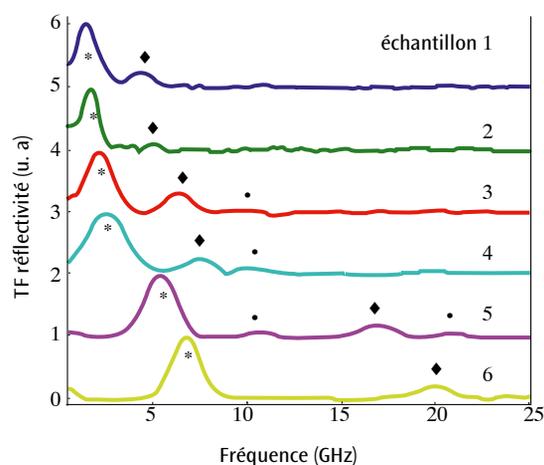


Figure 2. Transformées de Fourier (TF) de la réflectivité induites par le laser en fonction du retard pompe-sonde en fonction de la fréquence.

Références

- [1] A. AYOUCHE, X. DIEUDONNE, G. VAUDEL, H. PIOMBINI, K. VALLE, V. GUSEV, P. BELLEVILLE, P. RUELLO, "Elasticity of an Assembly of Disordered Nanoparticles Interacting via Either van der Waals-Bonded or Covalent-Bonded Coating Layers", *ACS Nano*, **6**(12), p. 10614–10621 (2012).
- [2] *Handbook of Chemistry and Physics*, 76th ed. ; Oxford : New York, 1999.
- [3] B. V. DERJAGUIN, V. M. MULLER, Y. P. TOPOROV, "Effect of Contact Deformation on the Adhesion of Particles", *J. Colloid Interface Sci.*, **53**, p. 314-326 (1975).

Chimie et électrochimie d'une interface cathode/électrolyte d'un accumulateur au lithium-ion

J. DEMEAUX - H. GALIANO / CEA – Le Ripault, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/LPCM2E n°1

B. CLAUDE-MONTIGNY - M. CAILLON-CARAVANIER - D. LEMORDANT / Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et des Électrolytes pour l'Énergie (LPCM2E), Université François Rabelais, Tours, Laboratoire de recherche correspondant LRC CEA/LPCM2E n°1

Les mécanismes de dégradation de l'interface $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ /électrolyte sont identifiés lorsque des compositions électrolytiques à base de carbonates d'alkyles sont employées. L'utilisation du noir de carbone comme matériau d'électrode met en évidence la contribution électronique à la formation de l'interface cathode/électrolyte. Une comparaison des électrolytes à base de carbonate d'éthylène (EC) et de carbonate de propylène (PC) (LiPF_6 , 1M) montre une capacité accrue de l'électrolyte à base de EC à former des films de passivation couvrant de la matière active *via* des processus faradiques grâce à une bonne stabilité vis-à-vis de l'oxydation. Ainsi, les cyclages en cellules $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4/\text{Li}$ confirment la supériorité des électrolytes à base de carbonate d'éthylène EC dans la formation des couches de passivation, menant à des pertes d'énergie réduites et à un plus grand rendement faradique. Cette étude se concentre donc sur la relation liant tenue à l'oxydation des électrolytes et leur capacité à protéger l'interface positive selon leur nature chimique.

La batterie Lithium-ion (Li-ion) est pressentie comme étant un dispositif de stockage de l'énergie compétitif pour des applications dans le véhicule électrique (VE), les véhicules hybrides électriques (VEH) ou des dispositifs photovoltaïques amenés à se développer dans le futur. Un accumulateur Li-ion comprend deux électrodes à base de composés d'intercalation et un électrolyte qui assure le transfert ionique (Li^+) entre l'anode et la cathode (figure 1a). Les récents développements au CEA-LITEN au niveau des matériaux d'électrode positifs ont amené à la formulation d'un oxyde de type spinelle dont la composition est $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$. Ce composé est un matériau potentiellement intéressant non seulement pour des dispositifs 5 V à haute énergie, mais également pour des dispositifs 3 V à forte puissance. Cependant, le développement des cellules utilisant des matériaux haute tension est limité par l'instabilité à haut potentiel ($E > 4,5$ V par rapport au couple Li^+/Li) des constituants de l'électrolyte (solvants organiques et sel de lithium). Dans le but d'améliorer la stabilité de la solution électrolytique, il est d'abord nécessaire d'identifier les mécanismes de décomposition chimiques et électrochimiques de ces composés et leur impact sur les performances en cyclage. Prenant appui sur une technologie 4 V aujourd'hui largement répandue, les compositions électrolytiques les plus courantes, décrites sur la figure 1b, restent des mélanges de carbonates d'alkyles cycliques (EC, PC) avec des carbonates d'alkyles linéaires comme le DMC.

Oxydation de l'électrolyte

Les calculs *ab initio* en phase gazeuse sur les molécules isolées EC et PC confirment les mesures expérimentales réalisées sur électrode de platine inerte et homogène. EC est plus stable vis-à-vis de

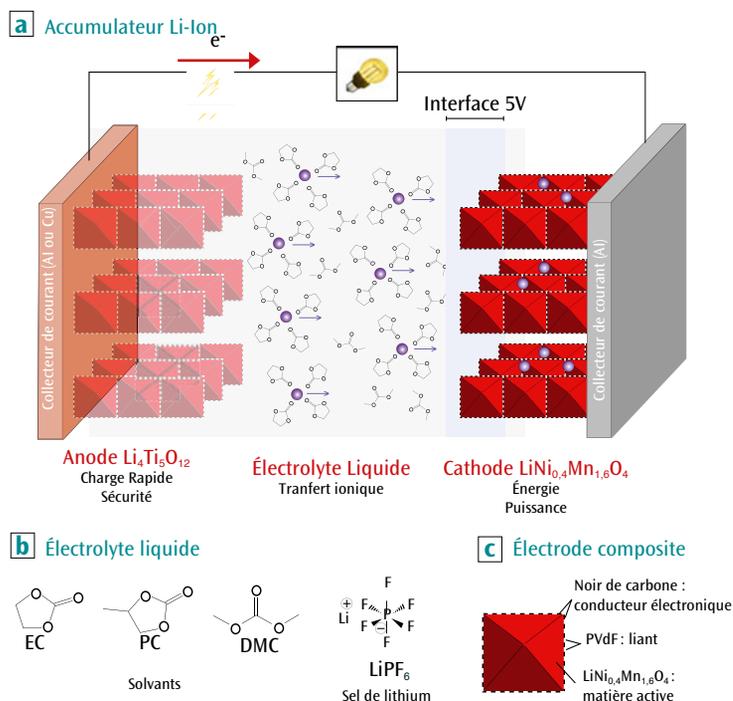
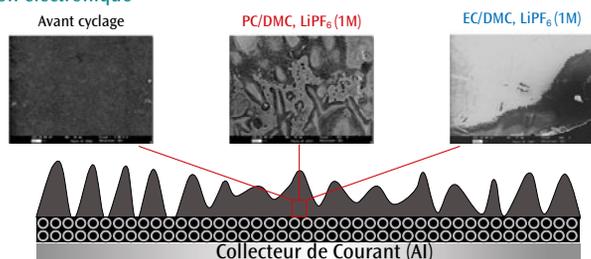


Figure 1. Accumulateur Lithium-ion 5 V.

(a) : fonctionnement en décharge d'un accumulateur Lithium-ion – (b) : solvants électrolytiques, sel de lithium – (c) : électrode composite.

a Contribution électronique



b Contributions chimiques et électrochimiques

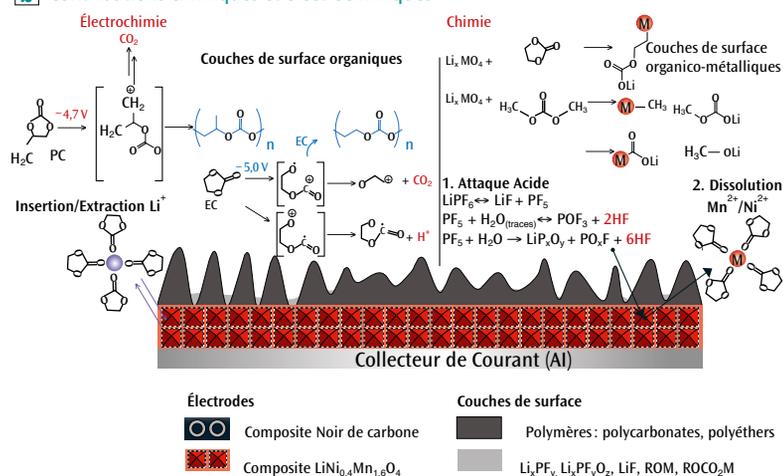


Figure 2. Chimie et électrochimie des interfaces.
 (a) : noir de carbone/électrolyte – (b) : $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ /électrolyte.

L'électrolyte PC/DMC, LiPF_6 (1M) forme des couches de passivation faiblement couvrantes de la matière active comparé à EC/DMC, LiPF_6 (1M) en raison d'une oxydation prononcée à 5 V générant du CO_2 en grandes quantités. Les pertes d'énergie et les faibles rendements faradiques sont également induits par une dissolution partielle du matériau d'électrode positif sous forme d'ions Mn^{2+} et Ni^{2+} dans l'électrolyte [1]. Dans le cas de PC/DMC, le film organique ne couvre pas suffisamment l'électrode pour stopper sa dissolution. EC/DMC présente une plus grande capacité à former des films de passivation couvrants par des processus faradiques, limitant ainsi les pertes d'énergie des accumulateurs Li-ion lorsque le régime de charge/décharge est suffisamment lent (< 1 heure) (figure 2).

Conclusion

Les produits de décomposition du solvant et du sel de lithium sur $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ sont de type ROM, ROCO_2M ($\text{M}=\text{Li}, \text{Mn}, \text{Ni}$), LiF, $\text{Li}_x\text{PF}_y\text{O}_z$, des polycarbonates et des polyéthers. Ces composés sont formés chimiquement sur le matériau nucléophile $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ et par décomposition du sel de lithium LiPF_6 . L'application de hauts potentiels (> 4,7 V par rapport au couple Li^+/Li) lors de la polarisation anodique provoque une polymérisation de EC et de PC, tandis que DMC forme des oligomères. L'électrolyte EC/DMC, LiPF_6 (1M) montre une grande résistance vis-à-vis de l'oxydation sur les matériaux d'électrode positifs testés et une propension à protéger l'interface 5 V par la formation de films organiques couvrants de la matière active. Naturellement, les électrolytes à base de EC assurent de meilleures performances à haut potentiel par rapport à leurs équivalents à base de PC [1,2].

l'oxydation non seulement en mélange simple, mais également en mélange binaire avec DMC.

Une comparaison des potentiels d'oxydation des électrolytes sur le conducteur électronique noir de carbone et sur l'électrode composite $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ démontre également que les couples redox du manganèse ($\text{Mn}^{IV}/\text{Mn}^{III}/\text{Mn}^{II}$) et du nickel ($\text{Ni}^{IV}/\text{Ni}^{III}/\text{Ni}^{II}$) ne catalysent pas la décomposition oxydative du solvant électrolytique. La décomposition de l'électrolyte est alors essentiellement liée à une haute valeur de potentiel ($E > 4,5$ V par rapport au couple Li^+/Li).

L'électrolyte EC/DMC, LiPF_6 (1M) présente une plus grande résistance à l'oxydation que PC/DMC, LiPF_6 (1M). Cependant, l'oxydation de l'électrolyte n'est pas le seul mécanisme responsable des pertes d'énergie des accumulateurs Li-ion, et il apparaît alors nécessaire de s'intéresser plus généralement à la dynamique de l'interface cathode/électrolyte.

Dynamique de l'interface et performances en cyclage

Les couches de passivation organiques formées par chimie et électrochimie à l'interface cathode/électrolyte s'épaississent avec la durée de stockage, la température et le nombre de cycles selon le modèle SPI (Solid Permeable Interface). La mise en évidence de la contribution électronique à la dynamique de l'interface est rendue possible par l'utilisation du noir de carbone. L'oxydation de l'électrolyte génère des ions et des radicaux qui se combinent avec les molécules de solvant pour former des polymères sur $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ (figure 2).

Références

- [1] J. DEMEAUX, D. LEMORDANT, M. CAILLON-CARAVANIER, H. GALIANO, B. CLAUDE-MONTIGNY, « New insights into a high potential spinel and alkylcarbonate-based electrolytes », *Electrochim. Acta*, **89**, p. 163-172 (2013).
- [2] J. DEMEAUX, M. CAILLON-CARAVANIER, D. LEMORDANT, H. GALIANO, B. CLAUDE-MONTIGNY, « $\text{LiNi}_{0.4}\text{Mn}_{1.6}\text{O}_4$ /electrolyte and carbon black/electrolyte high voltage interfaces: to evidence the chemical and electronic contributions of the solvent on the cathode-electrolyte interface formation », *J. Electrochem. Soc.*, **159** (11), A1880-A1890 (2012).

Vers une description atomistique de la décomposition des matériaux

■ D. MATHIEU / CEA – Le Ripault

En vue d'aboutir à un potentiel réactif classique utilisable pour simuler des réactions chimiques dans des matériaux organiques variés, une approche originale est présentée. Elle conduit à des énergies de réaction nettement améliorées par rapport aux valeurs que prévoit le potentiel ReaxFF.

Un matériau organique peut subir des modifications chimiques. Selon les cas, on cherche à s'en prémunir ou au contraire – dans le cas des explosifs – à les maîtriser pour les provoquer au moment voulu. Leur description repose en général sur des cinétiques empiriques propres à la substance considérée. Pour certains types d'explosifs, des hypothèses simplificatrices permettent de relier les paramètres de ces cinétiques à la structure moléculaire et de prévoir ainsi la sensibilité de nouveaux composés [1]. Cependant, seules des simulations atomistiques permettent d'aborder la réactivité dans un cas général.

Ces simulations reposent sur un potentiel, autrement dit un modèle permettant de calculer l'énergie d'un ensemble d'atomes connaissant leurs positions. Pour accéder aux principales

caractéristiques des réactions chimiques, à savoir leurs énergies et leurs barrières d'activation, il suffit en fait de pouvoir appliquer le potentiel à deux types de configurations : les états d'équilibre et les états de transition. Le recours à la mécanique quantique est en principe nécessaire en raison du rôle primordial des électrons dans toute réaction chimique. La complexité inhérente à cette théorie ne permet cependant pas de simuler des systèmes dotés de nombreux degrés de liberté en tirant un parti efficace des architectures massivement parallèles, d'où l'intérêt de ReaxFF, un modèle dont la particularité est de fournir des expressions explicites pour l'énergie d'un système sans passer par le calcul quantique de sa structure électronique [2].

Cependant, ces expressions dépendent de très nombreux paramètres calés afin de restituer des

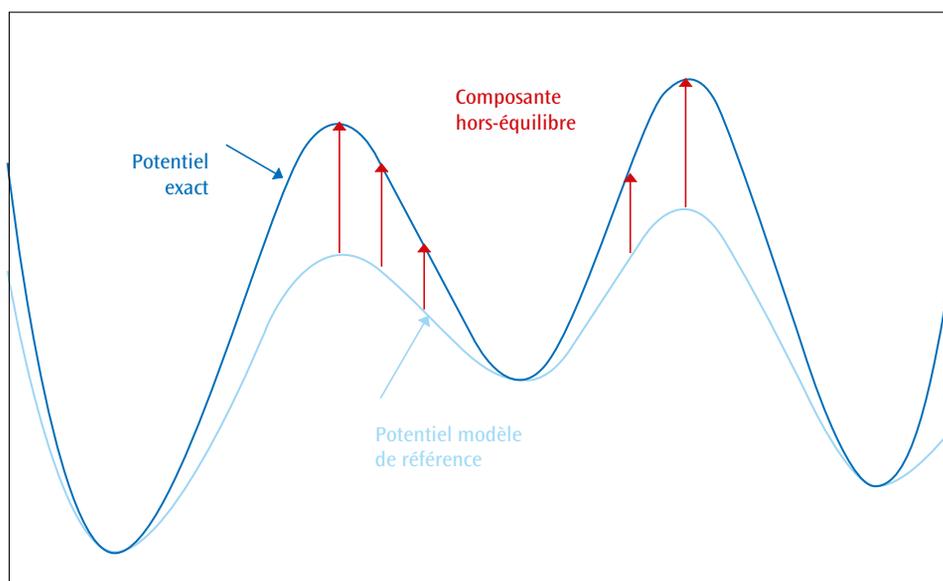


Figure 1. Développement d'un potentiel réactif à partir d'un modèle de référence qui coïncide avec le potentiel exact pour les géométries d'équilibre. La différence constitue la composante hors-équilibre.

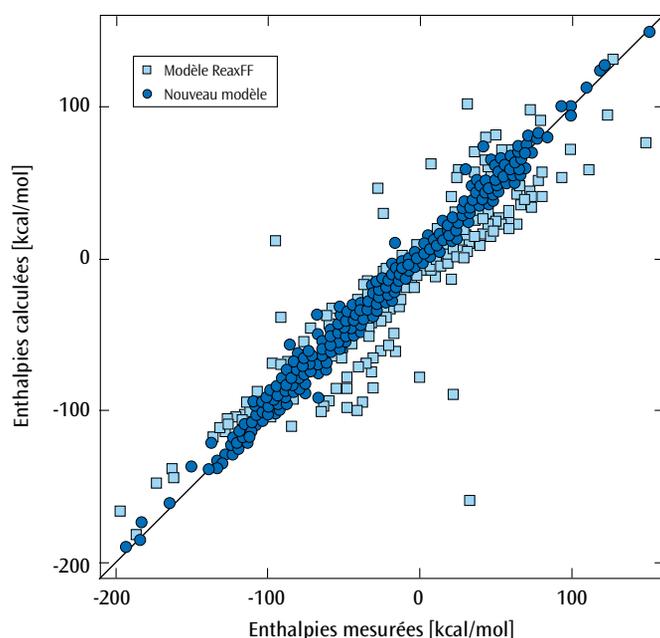


Figure 2. Enthalpies de formation calculées par ReaxFF et par le nouveau modèle [4], comparées aux valeurs expérimentales.

énergies *ab initio* calculées sur de petits systèmes. Elles conduisent alors à des résultats irréalistes pour des atomes dans des environnements très différents de ceux représentés dans ces systèmes modèles. Afin de garantir au mieux la transférabilité du potentiel, autrement dit sa capacité à décrire des systèmes très différents, il paraît judicieux de mettre à profit la disponibilité de nombreuses données pour les structures stables afin d'établir un modèle de référence, à compléter par la suite avec un terme correctif non nul pour les configurations non stationnaires, comme illustré sur la **figure 1**. Cette approche permet en outre de s'affranchir du biais induit par le fait que les données sur les états de transition sont moins nombreuses que celles sur les états d'équilibre.

Par ailleurs, en ce qui concerne la modélisation de la distribution électronique, une formulation basée sur les transferts de charge entre sites permet de remédier à certaines limitations des modèles existants, comme celui utilisé par ReaxFF, au niveau de la description de la séparation des charges lors d'une dissociation homolytique [3], correspondant à la rupture symétrique d'une liaison covalente avec formation de deux radicaux.

Enfin, pour les interactions à courte portée, ReaxFF repose sur un très grand nombre (plusieurs centaines) de paramètres empiriques, qu'il est souvent nécessaire de recalculer pour un nouveau matériau. En fait, chaque type d'interaction nécessite son propre jeu de paramètres, et le nombre d'interactions à N atomes croît exponentiellement avec N . Pour les hydrocarbures,

3 fonctions suffisent à décrire les interactions à 2 atomes (HH, CC et CH), mais il en faut 6 pour celles à 3 atomes (HHH, HHC, HCH, HCC, CHC, CCC). Pour s'affranchir de la prolifération des paramètres à laquelle on est confronté dès $N = 4$, dès lors que divers éléments (CHNO...) sont requis, il est souhaitable de se limiter à $N = 2$, autrement dit à un potentiel de paires [4].

Aussi radicale que puisse sembler cette approximation, elle n'empêche pas l'obtention de résultats améliorés par rapport au potentiel ReaxFF (**figure 2**) qui incorpore une pléthore de termes à 3 et 4 atomes. En réalité, le caractère multi-atomes des interactions est pris en compte via la dépendance du potentiel par rapport aux charges et ordres de liaison qui dépendent de la globalité du système.

La modélisation dans un cadre classique des forces entre atomes lors de réactions chimiques en est encore à un stade de développement préliminaire. Néanmoins, divers résultats prometteurs sont obtenus, aussi bien au niveau des forces de Coulomb résultant directement des charges qu'au niveau des forces entre atomes chimiquement liés. Ils constituent par ailleurs une base pour des méthodes moins empiriques d'estimation des propriétés thermochimiques.

Références

- [1] D. MATHIEU, "Theoretical Shock Sensitivity Index for Explosives", *J. Phys. Chem. A*, **116**, p. 1794-1800 (2012).
- [2] A. STRACHAN *et al.*, "Shock Waves in High-Energy Materials: The Initial Chemical Events in Nitramine RDX", *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 098301 (2003).
- [3] D. MATHIEU, "Split Charge Equilibration Method with Correct Dissociation Limits", *J. Chem. Phys.*, **127**, 224103 (2007).
- [4] D. MATHIEU, "Formation Enthalpies Derived from Pairwise Interactions: A Step toward More Transferable Reactive Potentials for Organic Compounds", *J. Chem. Theory Comput.*, **8**, p. 1295-1303 (2012).

Propriétés de couches magnétiques à anisotropie en hélice

M. GLOANEC - S. DUBOURG - F. DUVERGER - D. PLESSIS - A. BONNEAU-BRAULT / CEA – Le Ripault

Les couches minces magnétiques sont employées dans des dispositifs hyperfréquences pour les applications de télécommunications (substrats d'antennes, inductances planaires, filtres). Leurs performances sont intimement liées à l'homogénéité de leurs propriétés obtenues pendant la phase d'élaboration. Le cas typique d'une couche mince avec une anisotropie « en hélice » imposée pendant la fabrication est présenté ici. Une méthode originale d'évaluation de la dispersion d'aimantation générée a été développée. Elle démontre le très bon accord entre les cas expérimentaux et les cas calculés *via* un modèle micromagnétique 1D.

Le développement de matériaux magnétiques avec de forts niveaux de perméabilité, μ , sur une large gamme de fréquence, est un des principaux challenges pour le développement d'applications hyperfréquences. L'idéal est de pouvoir piloter leurs propriétés *via* un champ électrique. Cette agilité fréquentielle est obtenue dans des matériaux multi-ferroïques naturels ou artificiels présentant des propriétés ferroélectriques et magnétiques liées.

Pour autant, développer des matériaux « traditionnels » ferromagnétiques reste d'un grand intérêt. Parmi eux, les matériaux amorphes ou nanocristallins compensent leur manque d'agilité par de fortes perméabilités. Leur fréquence de résonance, F_r , qui détermine la fréquence de travail du dispositif, se situe entre 1 et 2 GHz. Cette fréquence dépend directement d'une grandeur appelée anisotropie magnétique. Elle est représentée par un vecteur \vec{H}_k , fonction de la nature du matériau, de sa structure, et plus généralement de son histoire (mode de dépôt,

traitement thermique...). Son orientation est la direction privilégiée de l'aimantation et son intensité impose la fréquence de résonance. Dans le cas d'un échantillon parfaitement homogène, cette dernière s'exprime par : $F_r = \bar{\gamma} \sqrt{4\pi M_s H_k}$ où $\bar{\gamma} = \frac{\gamma}{2\pi}$, avec γ le rapport gyromagnétique de l'électron, et M_s l'aimantation de saturation.

Pour aller au-delà de 2 GHz, ces matériaux doux sont associés à d'autres matériaux (isolants ou métalliques, paramétriques ou antiferromagnétiques) dans des structures multicouches [1]. Cette stratification accroît l'anisotropie par des couplages de surface. Les valeurs de perméabilités atteintes se dégradent rapidement lorsque le matériau doux est hétérogène, notamment lorsque son anisotropie fluctue en orientation ou en intensité.

Pour aller en deçà de 1 GHz, peu de solutions existent. Les plus efficaces consistent à pratiquer un recuit de la couche mince sous un champ magnétique tournant dont la fonction est de rendre aléatoire et isotrope la répartition des champs d'anisotropies locaux [2]. Ainsi distribués, ils se compensent et génèrent une anisotropie « effective » moins intense. Contrairement aux matériaux dédiés aux applications à hautes fréquences, la dispersion d'anisotropie est alors recherchée.

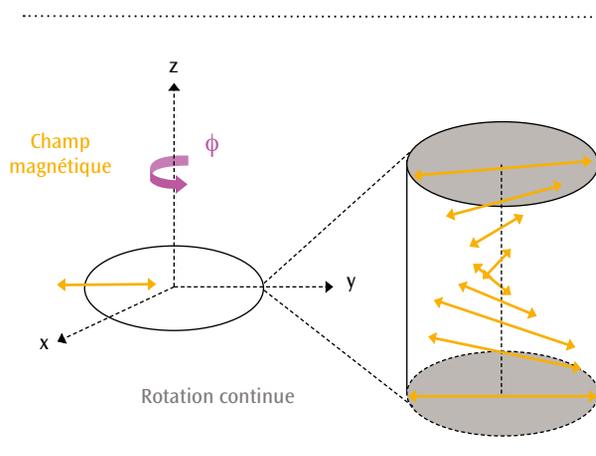


Figure 1. Profil d'anisotropie en hélice induit lors de l'étape de dépôt.

Un système modèle et une analyse originale de sa dispersion

Dans cette étude, nous avons fabriqué des couches magnétiques amorphes avec une anisotropie tournante dans l'épaisseur de la couche. Celle-ci a été obtenue par une rotation continue du substrat pendant l'étape de dépôt (figure 1). L'axe d'anisotropie est imposé par un champ magnétique extérieur fixe induisant un profil d'anisotropie en hélice. Chaque échantillon mesure 800 nm d'épaisseur tandis que le nombre de rotations effectuées varie de 0 à 16 tours.

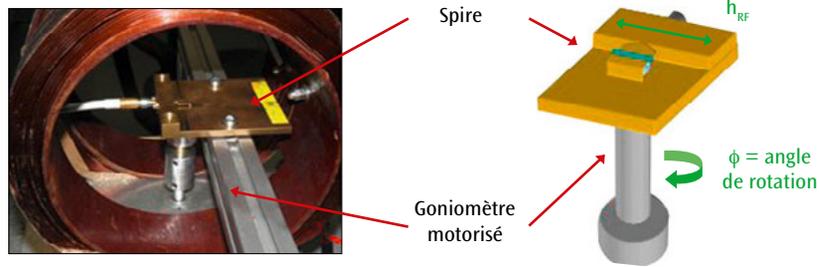


Figure 2. Photo et schéma de principe de la spire en rotation.

Les objectifs étaient multiples [3]:

- ▶ réduire l'anisotropie « effective » de la couche;
- ▶ valider une nouvelle méthode très générale pour mesurer la dispersion d'aimantation;
- ▶ corrélérer ces résultats avec un modèle micro-magnétique 1D.

La perméabilité des échantillons a été mesurée par la méthode de perturbation de spire sur laquelle a été implémenté un goniomètre motorisé de manière à effectuer une succession de mesures à différents angles dans le plan (figure 2). On montre que la variation angulaire de l'intégrale de la partie imaginaire de la perméabilité μ'' pondérée par la fréquence f se décrit simplement à partir de deux termes notés a_2 et b_2 , soit:

$$I(\phi) = \int_0^f \mu''(\phi, f) f df \approx I_{\max} [1 - a_2 \cos(2\phi) - b_2 \sin(2\phi)] / 2$$

De ces deux termes, on déduit la direction de l'anisotropie « effective » égale à $\arctan(a_2/b_2)$ et un terme de dispersion angulaire de l'aimantation $D = (a_2^2 + b_2^2)^{1/2}$. D tend vers 1 pour une couche dont l'aimantation est parfaitement alignée dans la même direction en tout point, et vers 0 pour une répartition d'aimantation isotrope.

Comparaison expérience et modèle

Sur la figure 3 sont présentées les mesures de la dispersion en fonction du nombre de tours [1]. Pour un nombre de rotations faible, l'aimantation suit

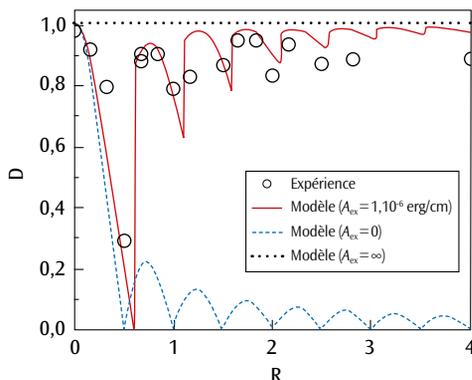


Figure 3. Dispersion angulaire mesurée et calculée en fonction du nombre de rotations.

parfaitement le profil en hélice imposé par l'anisotropie, et le terme D diminue progressivement. La dispersion de l'aimantation est optimale pour environ une demi-rotation pendant le dépôt. Pour un nombre de tours élevé, la dispersion s'estompe et D retend vers 1. Ce résultat est en accord avec le calcul micro-magnétique 1D (courbe rouge de la figure 3) qui tient compte de l'ensemble des énergies du système, c'est-à-dire l'énergie d'anisotropie en hélice qui distribue les axes d'anisotropies, et d'un terme, dit d'échange, qui force au contraire l'aimantation à s'aligner dans une même direction [4].

L'anisotropie effective de la couche passe de 15 Oe sans rotation à 7 Oe après 16 tours. Cette réduction est très significative même si une anisotropie parfaitement évanescence n'a pu être obtenue.

Conclusion

La réalisation d'un système modèle de couches minces a permis de valider une méthode de caractérisation très générale de la dispersion angulaire de l'aimantation dans des couches minces. Cette technique pourra être mise à profit pour optimiser des matériaux dédiés aux applications hyperfréquences.

Références

- [1] G. CHAI, Y. YANG, J. ZHU, M. LIN, W. SUI, D. GUO, X. LI, D. XUE "Adjust the resonance frequency of $(\text{Co}_{90}\text{Nb}_{10}/\text{Ta})_n$ multilayers from 1.4 to 6.5 GHz by controlling the thickness of Ta interlayers", *Appl. Phys. Lett.*, **96**, 012505 (2010).
- [2] K. SUZUKI, N. ITO, J.S. GARITAONANDIA, J.D. CASHION "High saturation magnetization and soft magnetic properties of nanocrystalline $(\text{Fe,Co})_{90}\text{Zr}_7\text{B}_3$ alloys annealed under a rotating magnetic field", *J. Appl. Phys.*, **99**, 08F114 (2006).
- [3] M. GLOANEC, S. DUBOURG, O. ACHER, F. DUVERGER, D. PLESSIS, A. BONNEAU-BRAULT, "Influence of a helical anisotropy profile on the static and dynamic properties of a soft magnetic layer", *Phys. Rev. B*, **85**, 094433 (2012).
- [4] V. DUBUGET, A. THIAVILLE, F. DUVERGER, S. DUBOURG, O. ACHER, A.-L. ADENOT-ENGELVIN, "Magnetization dynamics of soft films with thickness-dependent anisotropy", *Phys. Rev. B*, **80**, 134412 (2009).

Fragmentation de céramiques de blindage

B. ERZAR - J.-L. ZINSZNER - E. BUZAUD - P.-Y. CHANAL / CEA – Gramat

P. FORQUIN / Laboratoire d'étude des microstructures et de mécanique des matériaux, Université de Lorraine, Île du Saulcy, Metz

Les céramiques sont souvent employées dans les systèmes de protection malgré leur nature fragile qui les expose à une fragmentation intense en cas d'impact balistique. Les modèles couramment utilisés décrivent mal cet aspect du comportement. Dans cette étude, la machine GEPI du CEA–Gramat a été utilisée pour caractériser finement le comportement d'une alumine en traction à très haute vitesse de chargement. De plus, des simulations numériques ont été menées avec un modèle d'endommagement décrivant les mécanismes élémentaires activés au cours de la fragmentation des matériaux fragiles.

Les céramiques sont utilisées dans les blindages depuis les années 1960. Cette famille de matériaux offre des avantages indéniables en comparaison de blindages métalliques : gain de masse, dureté élevée qui permet d'endommager le projectile dès les premiers instants de l'impact. Toutefois, les céramiques souffrent d'une résistance en traction environ dix fois inférieure à leur résistance en compression, ainsi que d'une ténacité très faible. Lors d'un impact, ce caractère fragile se traduit par une fragmentation intense que les modèles actuels peinent à décrire.

Un nouvel essai de caractérisation du comportement en traction dynamique a été développé : il permet de valider une approche de modélisation basée sur la description micromécanique des phénomènes gouvernant le processus de fragmentation des matériaux fragiles.

Étude expérimentale de la fragmentation d'une alumine

Une alumine dense a été soumise à des essais d'écaillage grâce au moyen expérimental GEPI (Générateur électrique de pression intense). Ce dernier repose sur un concept développé par les laboratoires Sandia aux USA, qui met à profit les profils spécifiques du courant électrique pour générer des rampes de pression dans les matériaux. Le principe consiste à faire passer une forte impulsion de courant dans des électrodes plates générant ainsi un champ magnétique intense. Leur association conduit à l'application de forces volumiques de Laplace au sein des électrodes (**figure 1a**). La décharge contrôlée du courant permet de créer une rampe de compression s'étalant sur environ 550 ns [1]. Dans les essais dits « d'écaillage », l'impulsion de compression trans-

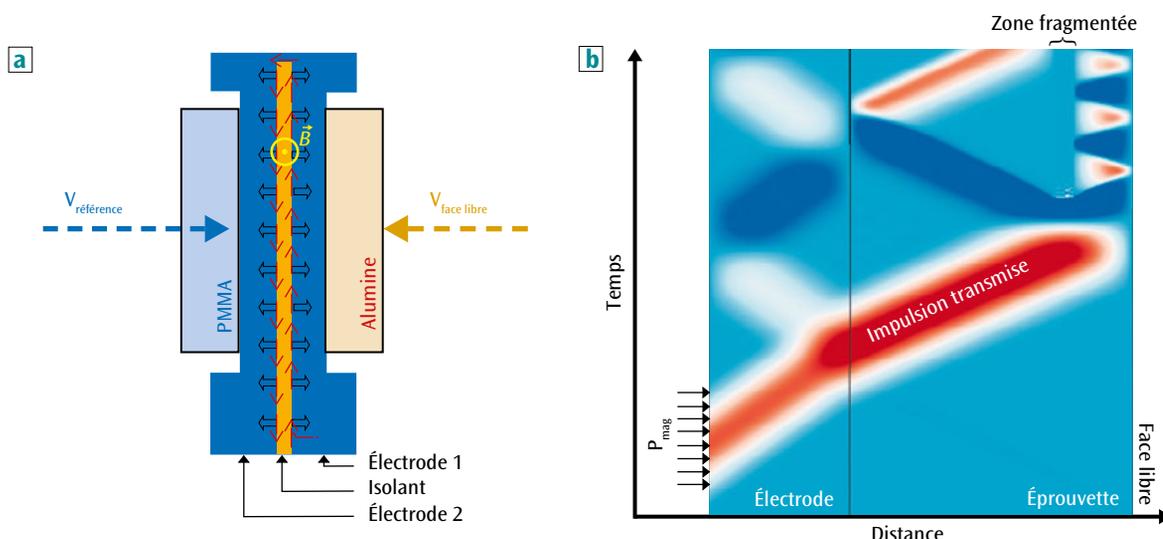


Figure 1. (a) : Schéma en coupe de la partie terminale du GEPI illustrant le principe utilisé pour la génération du chargement dynamique – (b) : Diagramme de marche de l'essai d'écaillage.

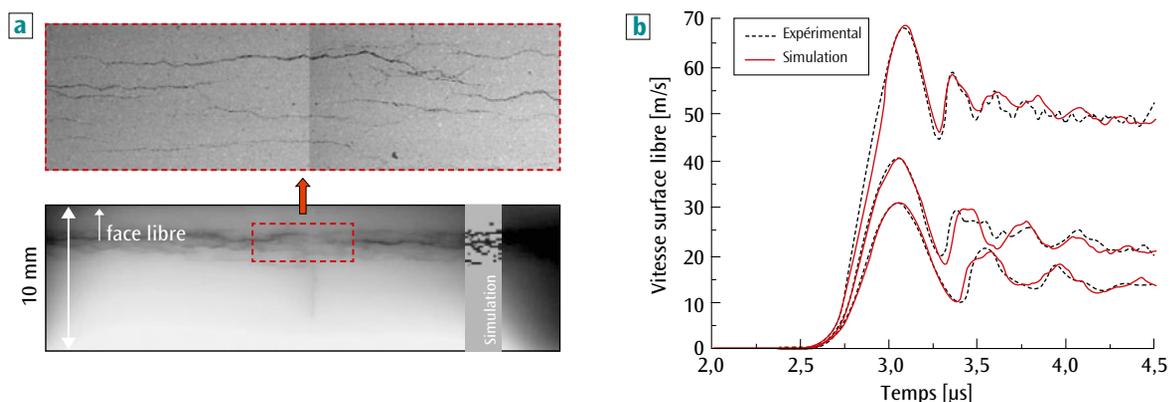


Figure 2. (a) : Analyse *post mortem* par microscopie optique et électronique à balayage d'une éprouvette d'alumine en limite d'écaillage et comparaison avec le faciès endommagé prévu par simulation – (b) : Comparaison des signaux de vitesse expérimentaux et numériques pour trois essais GEPI.

mise à l'alumine se propage jusqu'à la face arrière, libre de contrainte, où elle se réfléchit. Le croisement d'ondes de détente au cœur de l'éprouvette active le processus de fragmentation (**figure 1b**). Au contraire de l'essai d'écaillage par impact de plaque, l'essai GEPI permet de calculer précisément la vitesse de déformation, en tout point et à tout instant, grâce à l'augmentation progressive du chargement. Une mesure de vitesse est réalisée au niveau de la face libre de l'éprouvette. Ce signal permet de calculer la résistance dynamique du matériau et il renseigne aussi sur la cinétique d'endommagement. Une mesure témoin est généralement réalisée sur l'électrode opposée (**figure 1a**).

Cinq essais ont été conduits à différents niveaux de sollicitation. Les résultats ont montré une sensibilité de la résistance à la vitesse de chargement : une contrainte ultime de 408 MPa a été atteinte à 4900 s^{-1} , alors que l'on obtient 520 MPa pour un essai mené à $21\,500 \text{ s}^{-1}$ [2]. Cette sensibilité n'avait pu être mise en évidence par impact de plaque. La maîtrise des conditions expérimentales a aussi permis de récupérer une éprouvette en limite d'écaillage : le chargement a initié une fissuration multiple au cœur de l'éprouvette, mais il a été suffisamment limité dans le temps pour figer le processus de fragmentation avant la coalescence des fissures (**figure 2**). Ces données expérimentales sont autant d'éléments de validation pour une approche de modélisation.

Modélisation micromécanique de la fragmentation des céramiques

Le modèle de fragmentation développé par Denoual, Forquin et Hild [3,4] a été utilisé pour simuler la rupture dynamique de l'alumine. Cette approche s'appuie sur une description statistique de la population de défauts répartis dans la microstructure. Le modèle inclut aussi dans sa formulation les notions d'initiation, de propagation des fissures et d'occultation des défauts situés dans leur voisinage. Tous les essais ont été simulés

par éléments finis ; les profils expérimentaux et numériques de la vitesse relevée sur la face libre sont comparés sur la **figure 2b** pour trois d'entre eux. L'augmentation de résistance avec la vitesse de déformation, l'étendue de la zone endommagée ainsi que la cinétique d'endommagement sont bien reproduites par la simulation [5].

Conclusion

Les essais d'écaillage de céramiques de blindage par impact de plaque ne permettent pas de déterminer avec précision la vitesse de déformation au moment de l'initiation de l'endommagement dynamique. Cette donnée essentielle a pu être obtenue à partir d'essais réalisés sur la machine GEPI. La résistance en traction d'une alumine a ainsi montré une sensibilité importante à la vitesse de chargement. De plus, la récupération d'une éprouvette partiellement endommagée a donné un aperçu unique du processus de rupture dynamique. Ces données ont servi à la validation d'une modélisation micromécanique de la fragmentation dynamique des aluminés.

Références

- [1] P.-L. HEREIL, F. LASSALE, G. AVRILAUD, "GEPI : An ICE Generator for Dynamic Material Characterization and Hypervelocity Impact", *Shock Compression of Condensed Matter*, p. 1209-1212 (2003).
- [2] B. ERZAR, E. BUZAUD, "Shockless spalling damage of alumina ceramic", *Eur. Phys. J. – ST*, **206**, p. 71-77 (2012).
- [3] C. DENOUIL, F. HILD, "A damage model for the dynamic fragmentation of brittle solids", *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, **183**, p. 247-258 (2000).
- [4] P. FORQUIN, F. HILD, "A probabilistic Damage Model of the Dynamic Fragmentation Process in Brittle Materials", *Adv. Appl. Mech.*, **44**, p. 1-72 (2010).
- [5] J.-L. ZINSZNER, B. ERZAR, E. BUZAUD, *Dynamic Tensile Behaviour of Alumina Ceramic at Very High Strain-Rates, Opportunities and Challenges of Light-Weight Armour*, Eds E. Cadoni and H. Kaufmann, p. 147-154 (2012).

Une méthode eulérienne directe pour la simulation des écoulements compressibles multi-matériaux avec glissement

■ R. MOTTE - J.P. BRAEUNIG - M. PEYBERNES / CEA-DAM Île-de-France

La simulation des écoulements compressibles multi-matériaux représente un enjeu important car elle est le socle de nombreux codes multi-physiques. Pour bien prendre en compte le couplage avec d'autres domaines de la physique comme la turbulence ou la tension de surface, il faut limiter les défauts inhérents à la discrétisation des équations de l'hydrodynamique, *i.e.* la diffusion numérique ou l'absence de glissement aux interfaces. Nous proposons dans ce travail une méthode de simulation robuste et précise qui autorise le glissement des matériaux aux interfaces.

La simulation d'écoulements compressibles à plusieurs matériaux est essentielle aux applications du CEA/DAM. Citons par exemple la mise en œuvre d'explosifs en détonique ou de lasers intenses en fusion par confinement inertiel, qui font interagir des matériaux ayant de grands contrastes de densité ou de compressibilité, et qui sont soumis à de grandes déformations. De plus, les codes de calcul doivent être couplés à une physique complexe et s'adapter à de nouvelles architectures informatiques. Ceci demande une souplesse à la fois de l'informatique et de la méthode numérique. Nous proposons le schéma VFFC-NIP [1] qui est de type Volumes Finis à variables centrées, destiné à résoudre les équations d'Euler compressible. Dans un contexte industriel où l'on utilise des équations d'état réelles, nous souhaitons simuler des écoulements laminaires sans diffusion moléculaire. Pour traiter ce type d'écoulements, nous considérons donc des interfaces séparant des matériaux non miscibles. Dans ce contexte, nous permettons aux matériaux de glisser les uns par rapport aux autres, comme dans le cas de l'air et de l'eau par exemple.

Description de la méthode

À l'inverse d'une méthode lagrangienne dont le maillage suit le mouvement de la matière, une méthode eulérienne nécessite de calculer des flux des quantités conservées (masse, quantité de mouvement, énergie totale) entre les mailles, et de déterminer le mouvement des interfaces sur un maillage fixe. Les flux numériques sont

exprimés entre deux volumes, chacun étant associé à un état thermodynamique [1]. Dans le cas de mailles pures (contenant un seul matériau), ce flux est bien défini. En revanche, dans le cas des mailles mixtes (contenant plus d'un matériau), il est nécessaire d'y calculer une valeur moyenne de la pression et de la vitesse. Ceci rend cependant moins naturelle l'introduction de modèles de sous-maille tels que le glissement ou la tension de surface.

L'intérêt de notre approche est d'écrire une loi de conservation pour chaque matériau dans une maille mixte, en exprimant une condition de contact entre les matériaux sous la forme d'un flux, comme pour les mailles pures. Ceci permet de calculer la vitesse des interfaces et d'autoriser le glissement [1,2]. Cette démarche est rendue possible par la définition de variables spécifiques à chaque matériau (vitesse, densité, énergie totale), y compris dans une maille mixte. À titre d'illustration, nous présentons sur la **figure 1** le cas d'un choc de forte intensité se propageant dans de l'eau et interagissant avec une bulle d'air qui va être fortement déformée et comprimée.

Une méthode adaptée aux nouvelles architectures

L'implémentation de la méthode VFFC-NIP repose sur un « splitting » directionnel sur un maillage cartésien orthogonal. Le calcul du nouvel état des mailles d'une ligne du maillage est ici indépendant des autres lignes, ce qui nous a permis de définir un algorithme parallèle MPI (*Message Passing Interface*, librairie

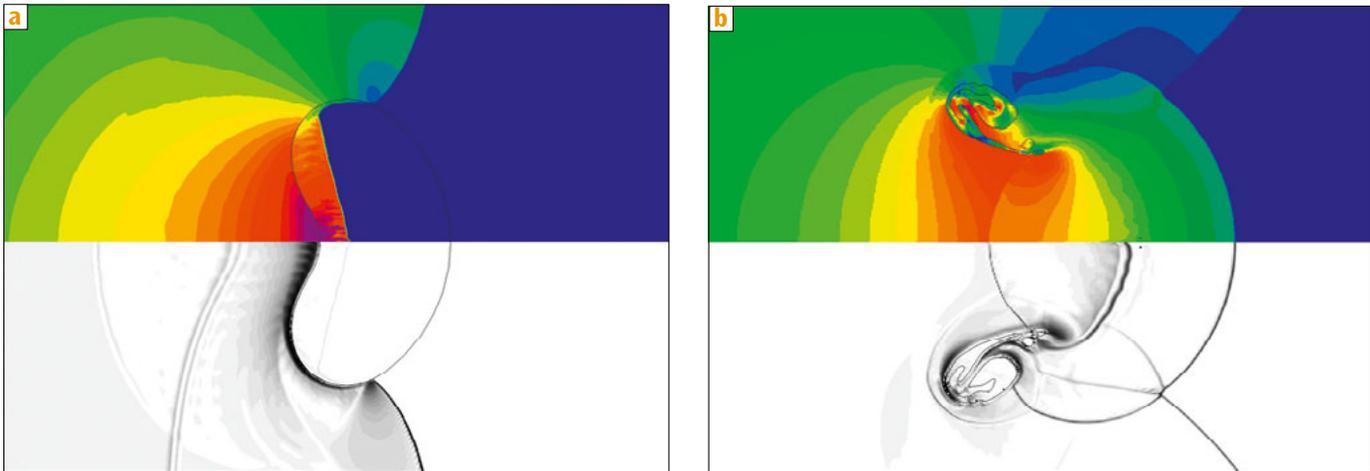


Figure 1. Simulation VFFC-NIP : interaction d'un choc dans de l'eau avec une bulle d'air aux temps $9,8 \mu\text{s}$ (a) et $16,5 \mu\text{s}$ (b) : en haut le module de la vitesse et en bas le gradient de la densité. Ces images illustrent le glissement par la discontinuité de la vitesse à l'interface (trait noir) et la position des ondes.

permettant la communication entre processeurs sur un système à mémoire distribuée) efficace par décomposition de domaine. Le système est découpé en tranches horizontales lors de la phase en X , verticales lors de la phase en Y , chaque tranche étant attribuée à processus MPI. Un algorithme de transposition permet de redistribuer les données par échange de messages MPI, pour passer d'un découpage en tranches horizontales à un découpage en tranches verticales et inversement. L'efficacité de ce parallélisme est due au fait que les communications ne concernent que la phase de transposition, alors que l'ensemble d'une phase X ou Y se fait sans communication. De plus, afin d'exploiter les futures architectures hétérogènes (processeurs multi-cœurs, accélérateurs graphiques de type GPU), des directives OpenMP et HMPP (bibliothèques permettant d'exploiter plusieurs cœurs ayant une mémoire partagée) ont été introduites, permettant de traiter une tranche MPI par plusieurs *threads* (processus légers attachés aux cœurs de calcul). L'algorithme hybride MPI-OpenMP, MPI-GPU permet ainsi de réduire fortement les communications MPI lors de la transposition et d'exécuter des calculs massivement parallèles (10 000 cœurs) avec une très bonne scalabilité.

Évolution vers un code multi-physique

Cette méthode numérique a été mise au point pour les équations d'Euler compressible en dimension deux. Depuis, elle a été étendue aux géométries axi-symétriques [3] et en dimension trois. D'autres phénomènes physiques ont été

modélisés : la tension de surface, un modèle d'hydrodynamique radiative, les écoulements à bas nombre de Mach [4], les écoulements bi-fluides et le traitement d'une surface libre avec du vide. La méthode VFFC-NIP a permis traiter chacun de ces modèles de manière générique, en écrivant le même système de lois de conservation dans les mailles mixtes que dans les mailles pures.

Références

- [1] J.-P. BRAEUNIG, B. DESJARDINS, J.-M. GHIDAGLIA, "A totally Eulerian Finite Volume solver for multi-material fluid flows", *Europ. J. Mech. B/Fluids*, **28**, p. 475-486 (2009).
- [2] R. LOUBERE, J.-P. BRAEUNIG, J.-M. GHIDAGLIA, "A totally Eulerian Finite Volume solver for multi-material fluid flows : Enhanced Natural Interface Positioning (ENIP)", *Europ. J. Mech. B/Fluids*, **31**, p. 1-11 (2012).
- [3] A. CHAMPMARTIN, J.-P. BRAEUNIG, J.-M. GHIDAGLIA, "An Eulerian Finite Volume solver for multi-material fluid flows with cylindrical symmetry", *Comput. Fluids* (2012), doi.org/10.1016/j.compfluid.2012.09.014.
- [4] D. CHAUVHEID, *Écoulements multi-matériaux et multi-physiques : solveur volumes finis eulérien co-localisé avec capture d'interfaces, analyse et simulations*, Thèse de l'école normale supérieure de Cachan, 2012.

Partitionnement et maillage quadrangulaire structuré par blocs pour des géométries multi-domaines

N. KOWALSKI - F. LEDOUX / CEA-DAM Île-de-France
 P. FREY / Laboratoire J.-L. Lions, Université Pierre et Marie Curie

Pour certaines simulations numériques, il est préférable de disposer de maillages quadrangulaires structurés par blocs ayant des caractéristiques précises telles que l'alignement des mailles le long du bord du domaine d'étude. En pratique, ces maillages sont majoritairement créés manuellement, ce qui représente un effort important pour l'ingénieur. Afin de réduire cet effort, nous proposons une méthode automatique permettant de générer de tels maillages avec la garantie d'un faible nombre de singularités. L'approche proposée repose sur la génération d'un champ d'orientations à l'aide de la résolution d'une équation aux dérivées partielles (EDP) non linéaire. En s'appuyant sur les singularités et séparatrices de ce champ, on génère alors un partitionnement du domaine géométrique en blocs quadrangulaires qui sont discrétisés à l'aide de maillages quadrangulaires structurés.

Des maillages quadrangulaires structurés par blocs

Pour de nombreuses simulations numériques 2D réalisées au CEA/DAM, les maillages quadrangulaires sont préférés aux maillages triangulaires. Le maillage n'est pas simplement quadrangulaire; il doit aussi:

- ▶ Respecter le bord géométrique, c'est-à-dire que des couches de mailles doivent être alignées le long du bord du domaine tout en capturant les sommets géométriques. On parle alors de maillage fondamental [1];
- ▶ Être le plus structuré possible, c'est-à-dire qu'il doit disposer d'un maximum de sommets internes réguliers de valence 4.

La génération de tels maillages passe actuellement par le partitionnement manuel du domaine d'étude en parties quadrangulaires qui sont ensuite discrétisées individuellement. L'objectif de ce travail est d'auto-

matiser l'étape de partitionnement d'un ou plusieurs domaines géométriques simultanément [2].

Définition d'un champ d'orientations

Partant d'un domaine géométrique Ω , notre approche consiste à générer un champ d'orientations sur Ω puis à en extraire le squelette topologique qui partitionnera Ω (figure 1). Pour à la fois disposer de couches de mailles alignées le long de la frontière $\partial\Omega$ de Ω et capturer « correctement » les sommets géométriques de $\partial\Omega$, nous propageons une orientation définie en tout point de $\partial\Omega$ de manière continue à l'intérieur du domaine Ω . Intuitivement, une orientation est définie comme étant une croix formée de 4 vecteurs unitaires orthogonaux ou opposés (figure 1a) [3].

Initialement, une orientation est définie en tout point P de $\partial\Omega$ à partir du vecteur normal unitaire

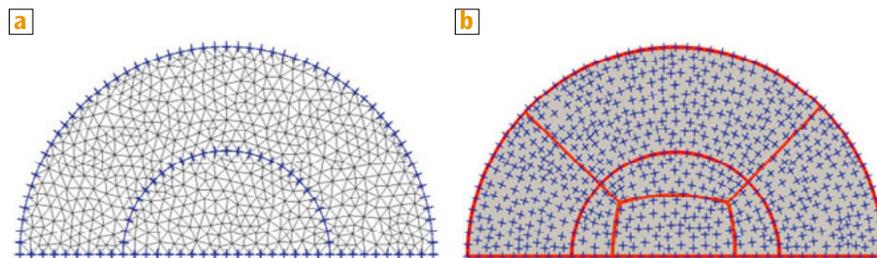


Figure 1. (a): Triangulation de Ω avec les orientations définies au bord de ses deux sous-domaines. (b): Champ d'orientations correspondantes avec tracé du squelette topologique (en rouge).

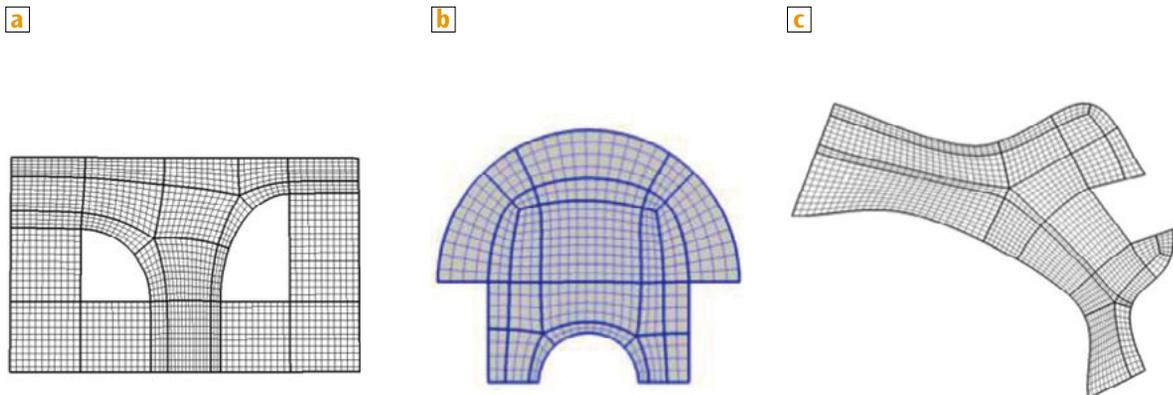


Figure 2. Trois domaines pour lesquels un partitionnement manuel est difficile. (a) : la différence de tailles entre les deux ouvertures se traduit par un non-raccordement des singularités de valence 5. – (b) : une géométrie symétrique où le nombre de singularités est minimisé. – (c) : un partitionnement où une couche mince apparaît dans le squelette.

\mathbf{n} à $\partial\Omega$ en P et des trois vecteurs formant une croix avec \mathbf{n} . Cette condition sur le bord est propagée sur Ω tout entier en résolvant une équation aux dérivées partielles correspondant au problème de la chaleur enrichi d'une contrainte non linéaire. Techniquement, cette équation n'agit pas directement sur des orientations, mais sur des vecteurs les représentant [4]. En outre, la résolution est faite de manière discrète sur Ω en se reposant sur les sommets d'un maillage triangulaire. Le champ discret obtenu est ensuite étendu de manière continue sur Ω afin de servir de support pour partitionner Ω (figure 1b).

Partitionnement du domaine géométrique

Nous extrayons alors le squelette topologique de ce champ continu composé de singularités, c'est-à-dire les points de Ω où le champ d'orientations s'annule, et de séparatrices, c'est-à-dire des lignes du champ d'orientations reliant les singularités entre elles (ou une singularité avec le bord). Par construction, ces singularités sont adjacentes à 3 ou 5 parties uniquement.

Ce squelette partitionne Ω en parties où le champ d'orientations est lisse, mais cela n'assure pas des parties quadrangulaires. Pour cela, nous complétons le squelette par l'ajout de singularités sur $\partial\Omega$ où la courbure est discontinue et l'ajout des lignes de champ en émanant (squelette complet en rouge sur la figure 1b). En appliquant un simple algorithme d'interpolation transfinie à chaque partie, on obtient un maillage quadrangulaire structuré par blocs que l'on peut adapter à des géométries complexes (figure 2).

Conclusion

L'algorithme proposé dans ce travail permet de partitionner automatiquement des géométries multi-domaines en parties quadrangulaires pour lesquels des algorithmes classiques de maillage quadrangulaire usuels peuvent être appliqués.

L'intégration de cet algorithme à nos outils de maillage permettra à l'avenir de réduire grandement le temps ingénieur consacré à la génération des maillages quadrangulaires. Nous travaillons actuellement à son extension 3D au maillage hexaédrique où nous espérons des résultats similaires pour une grande variété d'objets géométriques.

Références

- [1] F. LEDOUX, J. F. SHEPHERD, "Topological and geometrical properties of hexahedral meshes", *Eng. Comput.*, **26**(4), p. 419-432 (2010).
- [2] N. KOWALSKI, F. LEDOUX, P. FREY, "A PDE based Approach to Multi Domain Partitioning and Quadrilateral Meshing", *Proc. 21st International Meshing Roundtable*, October 2012, Springer, p.137-154 (2012).
- [3] N. RAY, B. VALLET, W. C. LI, B. LEVY, "N-Symmetry direction field design", *ACM Trans. Graph.*, **25**(4), p. 1460-1485 (2008).
- [4] J. PALACIOS, E. ZHANG, "Rotational symmetry field design on surfaces", *In SIGGRAPH'07, ACM, New-York, NY, USA*, 55 (2007).

Un nouveau type de schéma lagrangien pour les écoulements élastoplastiques

P.-H. MAIRE / CEA – Cesta

R. ABGRALL / INRIA Bordeaux Sud-Ouest, Institut de mathématiques de Bordeaux (IMB), Université de Bordeaux 1, Talence

J. BREIL / Centre lasers intenses et applications (CELIA), UMR 5107 Université de Bordeaux 1 – CNRS – CEA, Talence

R. LOUBÈRE / CNRS, Institut de mathématiques de Toulouse (IMT), Université Paul Sabatier, Toulouse

B. REBOURCET / CEA – DAM Île-de-France

Nous décrivons une méthode du type Volumes Finis dédiée à la simulation numérique de l'évolution temporelle de matériaux ductiles sous sollicitation dynamique intense. Le modèle employé est celui introduit par Wilkins pour décrire le comportement d'un matériau isotrope élastique parfaitement plastique. Le schéma de discrétisation appartient à la catégorie des méthodes lagrangiennes centrées aux mailles dites de Volumes Finis où les variables physiques caractérisant l'écoulement sont définies aux mailles d'une grille qui suit la matière dans son mouvement.

Contexte et objectifs

La simulation numérique des écoulements instationnaires compressibles multi-matériaux et multi-dimensionnels repose en partie sur l'utilisation de méthodes dites lagrangiennes pour lesquelles le maillage suit la matière dans son mouvement. La masse de chaque maille de la grille de calcul est conservée et les interfaces entre les matériaux sont suivies avec précision. Depuis plus de quarante ans, les schémas dits décalés [1] ont permis de simuler ce type d'écoulements en utilisant une localisation distincte des variables physiques: les quantités cinématiques sont définies aux nœuds du maillage en vue de rendre naturellement compte de son mouvement, tandis que les quantités thermodynamiques sont définies aux mailles.

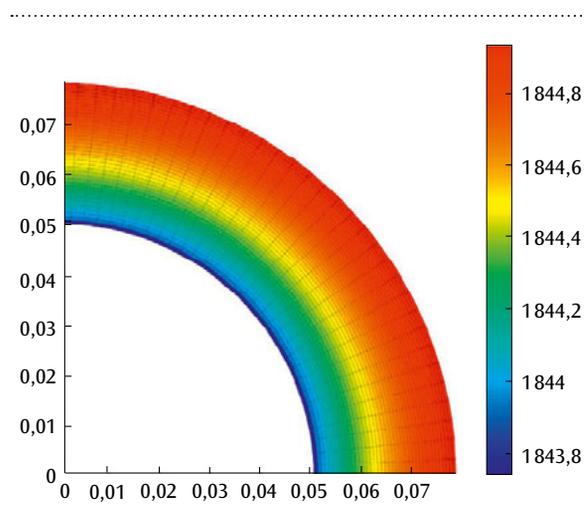


Figure 1. Champ de densité massique (kg/m^3) et maillage de la coquille à l'instant final. Les axes sont gradués en mètres.

Le développement récent d'une classe de schémas centrés [2,3] caractérisés par une localisation spatio-temporelle unique de toutes les variables physiques, a ouvert de nouvelles perspectives. Ces schémas sont une alternative prometteuse aux schémas décalés de par le respect des propriétés des modèles physiques (conservation, entropie) et des capacités des techniques numériques (convergence, maillage adaptatif). En effet, les schémas centrés reposent sur une formulation discrète des lois de conservation de la mécanique pour le volume, la quantité de mouvement et l'énergie totale caractérisée par les trois principes fondamentaux suivants:

- ▶ la vitesse des nœuds est compatible avec la variation de volume des mailles, ce qui garantit la nature lagrangienne de l'algorithme;
- ▶ l'énergie totale et la quantité de mouvement sont rigoureusement conservées, ce qui rend le schéma convergent;
- ▶ l'énergie cinétique est naturellement convertie en énergie interne à travers les chocs conformément au second principe de la thermodynamique, et ce sans recourir à l'ajout d'une viscosité artificielle *ad hoc*.

L'application de cette nouvelle approche à la simulation des écoulements multi-matériaux fortement compressibles a fourni des résultats de qualité supérieure ou égale à ceux obtenus avec l'approche décalée historique, tant en formalisme lagrangien pur [4] qu'en formalisme de maillage adaptatif [5] qui a été considérablement simplifié par le centrage de l'ensemble des variables physiques.

Nous proposons une extension des schémas centrés [6] dédiée à la simulation numérique d'écoulements élastoplastiques en utilisant le modèle dit

de Wilkins [1], couramment utilisé dans les codes d'hydrodynamique. Ici, le tenseur des contraintes de Cauchy est décomposé en une partie sphérique et une partie déviatorique. La partie sphérique correspond à la pression thermodynamique définie par une équation d'état du type Mie-Grüneisen. Quant à la partie déviatorique, elle est régie par une équation exprimant l'évolution temporelle du déviateur des contraintes en fonction du tenseur des taux de déformation, au moyen d'une dérivée objective. La plasticité est modélisée au moyen du critère de von Mises; son traitement numérique utilise la méthode dite du retour radial. Une attention particulière est portée à la consistance thermodynamique de ce modèle ainsi qu'à l'influence du choix de la dérivée objective utilisée pour la loi de comportement.

Illustration numérique

On considère l'implosion cylindrique d'une coquille dont l'énergie cinétique initiale est entièrement convertie en un temps fini en énergie interne par dissipation plastique [7]. On dispose analytiquement de la valeur des rayons interne et externe de la coquille à l'instant final, en fonction de sa mise en vitesse initiale. La figure 1 représente le maillage correspondant à un quart de la coquille et le champ de densité à l'instant final. Sur la figure 2, on observe que les valeurs de la solution analytique sont atteintes démontrant les propriétés de conservation et de convergence du schéma. Les bilans d'énergie cinétique, interne et totale de la coquille au cours du temps sont représentés sur la figure 3.

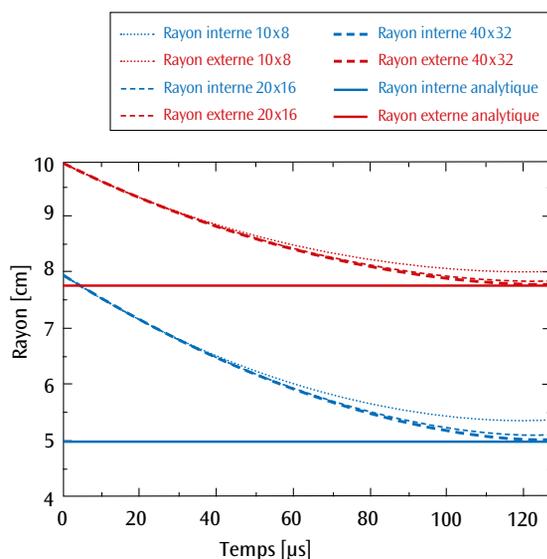


Figure 2. Tracé des rayons internes et externes de la coquille en fonction du temps. Étude de la convergence en maillage de la solution numérique vers la valeur analytique au temps final des rayons interne et externe.

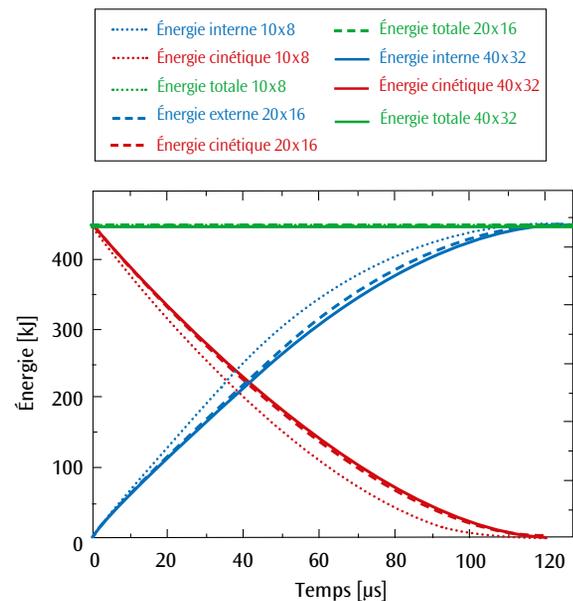


Figure 3. Étude de la convergence en maillage de la solution numérique pour les bilans d'énergie totale, cinétique et interne en fonction du temps.

Conclusion

Un nouveau type de schéma lagrangien pour l'élastoplasticité est proposé. Il allie respect de la physique et des propriétés numériques nécessaires à la fiabilité des calculs. Nous envisageons dans un futur proche de construire l'extension 2D axisymétrique de ce schéma numérique afin de valider cette méthode sur des résultats expérimentaux d'impact de cylindres du type impact de Taylor.

Références

- [1] M. L. WILKINS, *Calculation of elastic-plastic flows*, Methods in Computational Physics, Academic Press (1964).
- [2] B. DESPRÉS, C. MAZERAN, "Lagrangian gas dynamics in two dimensions and Lagrangian systems", *Arch. Rational. Mech. Anal.*, **178**, p. 327-372 (2005).
- [3] P.-H. MAIRE, R. ABGRALL, J. BREIL, J. OVADIA, "A cell-centered Lagrangian scheme for compressible flow problems", *SIAM J. Scien. Comp.*, **29**, p. 1781-1824 (2007).
- [4] P.-H. MAIRE, "A high-order cell-centered Lagrangian scheme for two-dimensional compressible fluid flows on unstructured meshes", *J. Comput. Phys.*, **228**, p. 2391-2425 (2009).
- [5] S. GALERA, P.-H. MAIRE, J. BREIL, "A two-dimensional unstructured cell-centered multi-material ALE scheme using VOF interface reconstruction", *J. Comput. Physics.*, **229**, p. 5755-5787 (2010).
- [6] P.-H. MAIRE, R. ABGRALL, J. BREIL, R. LOUBÈRE, B. REBOURCET, "A nominally second-order cell-centered Lagrangian scheme for simulating elastic-plastic flows on two-dimensional unstructured grids", *J. Comput. Physics.*, **235**, p. 626-665 (2013), doi: 10.1016/j.jcp.2012.10.017 (2012).
- [7] G. KLUTH, B. DESPRÉS, "Discretization of hyperelasticity on unstructured mesh with a cell-centered Lagrangian scheme", *J. Comput. Physics.*, **229**, p. 9092-9118 (2010).

Modélisation des explosions avec postcombustion

E. LAPÉBIE - L. MUNIER / CEA – Gramat

R. SAUREL - G. HUBER - G. JOURDAN / Institut universitaire des systèmes thermiques industriels (IUSTI), Université Aix-Marseille, Marseille

R. SAUREL / Société Recherche scientifique et simulation numérique (RS2N), Roquevaire

Les codes de dynamique rapide semblent capables de simuler la détonation d'explosifs condensés dans l'air et restituent généralement bien les surpressions aériennes mesurées. Mais la physique sous-jacente est-elle pour autant bien modélisée? En fait, ces codes ne prennent pas en compte le fait qu'une partie non négligeable de l'énergie d'un explosif est dégagée lors de l'oxydation des produits de la détonation anaérobie par l'oxygène de l'air. Pour le TNT (trinitrotoluène), l'énergie spécifique de postcombustion est environ le double de l'énergie spécifique de détonation. Nous avons développé une approche innovante pour la modélisation 1D des phénomènes de mélange turbulent et de postcombustion. Le modèle, qui contient un unique paramètre, reproduit non seulement les surpressions aériennes, mais aussi le diamètre stabilisé de la boule de feu et les temps d'arrivée du choc secondaire, deux paramètres que les codes classiques échouent à restituer.

Les compétences du CEA-Gramat couvrent l'expertise sur le fonctionnement détonique et les effets de munitions, d'explosifs occasionnels ou d'explosions industrielles. Dans tous les cas, nous étudions les effets physiques générés (onde de souffle, déformation et rupture des matériaux connexes, transferts thermiques radiatifs...). Les caractéristiques de l'onde de souffle aérienne sont essentielles, car elles conditionnent les conséquences d'une explosion sur l'environnement.

On pourrait penser que le fonctionnement d'explosifs classiques soit bien modélisé. La majorité des codes néglige pourtant le fait qu'un explosif ne libère qu'une fraction de son énergie durant la détonation. Celle-ci génère des produits partiellement sous-oxygénés qui, en se mélangeant à l'air ambiant, vont subir des réactions aérobies. L'énergie libérée par ces réactions de postcombustion peut être supérieure à l'énergie de détonation.

Pour traiter correctement ces problèmes, nous avons développé un nouveau modèle de mélange turbulent et de postcombustion [1].

État de l'art

La détonation de charges sphériques d'explosif est une expérimentation de référence qui vise à quantifier les effets d'une explosion. Les moyens de mesure et de visualisation mis en œuvre permettent, d'une part, de suivre l'évolution temporelle des surpressions générées à différentes distances et, d'autre part, de suivre le développement de la «boule de feu». L'observation de cette dernière montre de nombreuses instabilités qui traduisent un mélange turbulent (et réactif) entre les gaz de détonation et l'air (figure 1).

La géométrie des tests autorise une modélisation 1D sphérique des phénomènes. Les codes classiques utilisent une modélisation eulérienne, dans laquelle produits de détonation et air environnant sont séparés par une interface, sur laquelle sont respectées les conditions d'égalité de pressions et de vitesses normales. En conséquence, il ne peut pas y avoir d'interpénétration entre les deux milieux, et lorsque des instabilités se développent à l'interface, celles-ci sont pure-



Figure 1. Développement d'une boule de feu au voisinage de sa taille maximale (charge hémisphérique au sol ; images espacées de 1 ms). Les structures visibles à la surface sont le résultat d'instabilités liées au mélange turbulent entre gaz de détonation et air.

ment numériques et ne traduisent pas une réalité physique.

Certains codes toutefois traitent les mailles d'interface, contenant à la fois les produits de détonation et l'air, avec une méthode « chimie à vitesse infinie ». La méthode consiste à faire apparaître de manière instantanée (vitesse infinie) dans les mailles considérées un troisième matériau, les produits de combustion, selon la stœchiométrie et le bilan énergétique des réactions chimiques. Il s'agit toutefois d'un artifice numérique, puisque la zone de mélange utilisée n'est pas issue de l'interpénétration entre gaz réactifs et air ambiant.

La comparaison entre résultats numériques et expérimentaux montre malgré tout un accord correct entre signaux de pression mesurés et calculés (temps d'arrivée et pics de surpression), pour des capteurs situés à une distance suffisante de la charge. L'accord sur la dimension stabilisée de la boule de feu est nettement moins bon. De même, le temps d'arrivée et l'intensité du pic de pression secondaire sont mal restitués.

Élaboration du modèle

La simulation numérique directe multi-D des instabilités réactives se heurte à des difficultés d'ordre pratique (perturbation initiale à l'interface), informatique (maillage assez fin pour capturer chaque instabilité) et numérique (résultat dépendant du code, même pour une instabilité unique [2]). De nombreuses approches réduites ont été décrites : modèles $k-\varepsilon$, multiphasiques, de perturbations linéaires... Les plus performantes contiennent un nombre considérable de paramètres [3] dont l'identification pose problème.

Nous avons développé un nouveau modèle qui appartient à la classe des modèles multiphasiques. Les détails de son élaboration sont donnés en [1]. Le modèle d'écoulement moyen a été étendu par un modèle d'interpénétration. L'étude de ce dernier, dans la limite d'une relaxation rapide des vitesses, aboutit à une description qui :

- ▶ contient un paramètre unique (similaire à une viscosité artificielle);
- ▶ respecte les conditions d'interface en l'absence d'interpénétration;
- ▶ préserve l'hyperbolicité des équations et la dynamique des ondes;
- ▶ est thermodynamiquement cohérente.

La réaction chimique est traitée par l'approche « chimie à vitesse infinie », mais avec une zone de mélange correctement calculée.

Comparaison expériences / calcul

Des comparaisons expériences/calcul ont été menées sur le développement d'instabilités en tube à choc, dans les configurations léger/lourd et lourd/léger, ainsi que sur la détonation de charges sphériques. Seul ce dernier cas est illustré. Les expérimentations de charges de TNT et de HMX (octogène) menées au CEA - Gramat ont servi de référence. Les

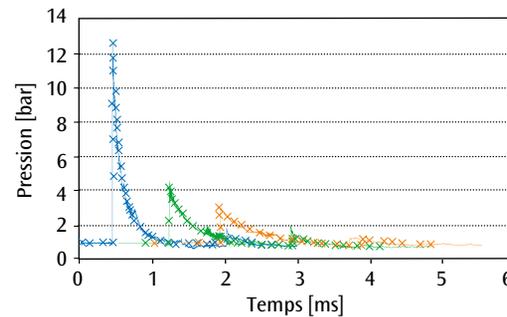


Figure 2. Comparaison expériences (traits) / calculs (x) pour les signaux de pression issus de la détonation en champ libre d'une charge sphérique de HMX de 708 g. Mesures de pression à 0,99 m (bleu); 1,59 m (vert) et 2,00 m (orange) du centre de la charge.

conditions initiales des calculs prennent en compte les profils de pression, densité et vitesse dans la charge.

Le modèle restitue correctement les temps d'arrivée et la forme générale des signaux de pression, que l'on active ou non la prise en compte de l'interpénétration et de la postcombustion, ce qui n'est pas surprenant au vu des résultats publiés avec d'autres codes. Ces seules comparaisons ne sont donc pas suffisantes pour juger de la qualité d'un modèle. Le nouveau modèle restitue par contre le temps d'arrivée et l'intensité du choc secondaire (figure 2), ce qui signifie que la dynamique des ondes dans la zone de mélange est bien modélisée. Le rapport R/R_0 entre rayon maximal de la boule de feu et rayon initial de la charge pour le TNT vaut environ 24 expérimentalement, 17 pour le modèle sans interpénétration, et 22 pour le modèle complet. Pour le HMX, l'accord entre modèle complet et mesures est similaire.

Conclusion

Le nouveau modèle a été comparé à des expériences différentes en termes de rapport de pressions entre milieu haute pression et milieu basse pression. Dans tous les cas, le calage d'un paramètre unique suffit à reproduire de manière satisfaisante les résultats expérimentaux.

Nos travaux actuels portent, d'une part, sur la détermination *a priori* de ce paramètre pour une configuration expérimentale donnée et, d'autre part, sur l'extension du modèle en 3D et son intégration dans la plateforme multiphasique CHYMERE, développé par RS2N et l'IUSTI au profit du CEA - Gramat. Enfin, des travaux supplémentaires sont prévus pour prendre en compte une phase solide dispersée afin, en particulier, de pouvoir simuler les explosifs aluminés et les charges à effets de souffle renforcé.

Références

- [1] R. SAUREL, G. HUBER, G. JOURDAN, E. LAPÉBIE, L. MUNIER, "Modelling spherical explosions with turbulent mixing and post-detonation", *Phys. Fluids*, **24**(11), p. 115101-1–115101-42 (2012).
- [2] R. LISKA, B. WENDROFF, "Comparison of several difference schemes on 1D and 2D test problems for the Euler equations", *SIAM J. Sci. Comput.*, **25**(3), p. 995-1017 (2004).
- [3] B. CHENG, "Review of turbulent mixing models", *Acta Math. Sci.*, **29B**(6), p. 1703–1720 (2009).

PRIX DU MEILLEUR ARTICLE

À l'occasion de la conférence IMR 2012 (International Meshing Roundtable, San Jose - États-Unis), le prix du meilleur papier technique a été remis aux experts Nicolas Kowalski et Franck Ledoux du CEA - DAM Île-de-France. Ce travail, auquel a également contribué un chercheur de l'Université Pierre et Marie Curie, décrit une méthode géométrique de maillage en quadrilatères basée sur la résolution d'une équation aux dérivées partielles.

2ND PRIX DU MEILLEUR DU MEILLEUR ARTICLE DU CONGRÈS « 36TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON ADVANCED CERAMICS AND COMPOSITES »

Aurélien Serre, doctorante au CEA - Le Ripault, a obtenu le second prix du meilleur article au congrès « 36th International Conference on Advanced Ceramics and Composites », congrès majeur sur les composites haute température, qui s'est déroulé à Daytona Beach, du 22 au 27 janvier 2012. L'article, intitulé "Study of the ceramic matrix composites densification by film boiling process", portait sur le procédé de caléfaction utilisé pour la densification des composites à matrice céramique.

PRIX DU MEILLEUR POSTER

« **Fanny Lalire**, doctorante au CEA - Valduc, a reçu le prix du meilleur poster de la session « Materials Science » à l'occasion de la conférence internationale « Pu Futures - The Science 2012 », co-organisée par l'AWE, le CEA et l'Institut des transuraniens de Karlsruhe (Allemagne), qui s'est déroulée en juillet 2012 à Cambridge (Royaume-Uni). Le poster intitulé « Kinetic study of $\delta \rightarrow \alpha'$ isothermal martensitic transformation in PuGa1at% » démontre l'intérêt d'utiliser un modèle de nucléation autocatalytique de type Pati & Cohen, développé pour l'étude de la transformation martensitique isotherme dans les alliages FeNiMn, afin de décrire la cinétique de transformation $\delta \rightarrow \alpha'$ lors d'un maintien à basse température d'un alliage PuGa 1at% . »

LE CALCUL HAUTE-PERFORMANCE RÉCOMPENSÉ

Le 2^e prix Bull-Joseph Fournier 2012 a été attribué à des chercheurs du CEA-DAM Île-de-France, pour leurs travaux menés dans le cadre d'une thèse sur la simulation des processus d'autofocalisation optique et de rétrodiffusion Brillouin.

Les simulations ont été conduites sur les supercalculateurs du Centre de calcul recherche et technologie (CCRT) du CEA. Le prix a été remis à l'occasion du Forum Ter@tec qui se déroulait à l'école Polytechnique, sur le plateau de Saclay.

UN ARTICLE DE RÉFÉRENCE POUR LES DONNÉES NUCLÉAIRES À LA DAM

Le journal à comité de lecture *European Physical Journal A - Hadron and Nuclei* a publié un article sur les études menées à la DAM dans le domaine des données nucléaires. Cette publication est une adaptation en anglais et dans un journal à comité de lecture, du numéro 40 de la revue *chocs* consacré aux données nucléaires. Le CEA-DAM Île-de-France et le CEA-Valduc ont contribué à cette publication.

NOMINATIONS

RENÉ CRUSEM (CEA-DAM Île-de-France) a été élu président du Groupement d'intérêt scientifique RESIF pour une durée de 2 ans. Le GIS RESIF regroupe les organismes français impliqués dans l'étude de la croûte et du manteau terrestre (CNRS-INSU, CEA, universités, BRGM, IRSN, CNES, IGN, IRD, IFFSTAR).

ALAIN BOURDIER (CEA-DAM Île-de-France) a été élu *EPS Fellow* par l'European Physical Society pour ses travaux concernant la dynamique des électrons en régime relativiste.

JEAN AUPIAIS, directeur de recherche au CEA-DAM Île-de-France, spécialité radiochimie, a été nommé membre de section du Comité national de la recherche scientifique (CNRS) par le ministre de l'Enseignement supérieur et de la recherche.

LES ARTICLES LES PLUS TÉLÉCHARGÉS DE LA REVUE HEDP

La revue *High Energy Density Physics* a édité la liste des 25 articles, publiés entre décembre 2005 et décembre 2011, les plus téléchargés au cours de l'année 2011. Cette liste comporte trois publications de physiciens du CEA-DAM Île-de-France. Le premier, paru en décembre 2011, se rapporte au calcul de l'opacité d'un plasma chaud; les deux autres, publiés en juin et décembre 2010, sont relatifs à l'accélération d'électrons par onde de sillage et aux lois d'échelle en astrophysique de laboratoire.

HABILITATIONS À DIRIGER LES RECHERCHES EN 2012

A. CASNER

(CEA-DAM Île-de-France)

Expériences d'instabilités hydrodynamiques et d'implosions en fusion par confinement inertiel.

DAVID DAMIANI

(CEA-Le Ripault)

Élaboration, mise en forme et caractérisation de matériaux pour l'énergie par interaction rayonnement-matière.

HERVÉ GALIANO

(CEA-Le Ripault)

Matériaux pour l'énergie: des matériaux pour pile à combustible... vers de nouveaux électrolytes pour batteries.

HÉLÈNE HÉBERT

(CEA-DAM Île-de-France)

Simulation numérique des tsunamis, prévention de l'aléa et étude des grands séismes.

NATHALIE PILLET

(CEA-DAM Île-de-France)

Many-body problem and nuclear long range correlations.

INAUGURATION DU LRC LIMPE

Le Laboratoire interactions matériau – procédé – environnement (LIMPE), a été inauguré fin juin à l'université de Bourgogne, en présence des signataires de l'accord de création de ce laboratoire de recherche conventionné : le CNRS et l'université de Bourgogne, représentés par le Laboratoire interdisciplinaire Carnot de Bourgogne, et le CEA, représenté par la direction scientifique de la DAM et la direction du CEA – Valduc. Cet événement a été l'occasion de présenter les principaux thèmes d'études du LIMPE (relations microstructure – corrosion, impact des procédés de fabrication). Des exposés sur des sujets spécifiques (corrosion des aciers, impact de l'usinage...) ont illustré les perspectives de ce nouveau laboratoire.

INAUGURATION DU SUPERCALCULATEUR CURIE

Le 12 juillet, la ministre de l'Enseignement supérieur et de la Recherche, a inauguré le supercalculateur Curie, en présence notamment de l'Administrateur général du CEA, du PDG de Genci (Grand équipement national de calcul intensif), du PDG de Bull et du directeur du centre DAM île-de-France. Conçu par la société Bull et exploité par les équipes du Très grand centre de calcul du CEA (TGCC) à Bruyères-le-Châtel, ce supercalculateur d'une puissance de 2 pétaflops (2 millions de milliards d'opérations par seconde) est l'une des dix machines les plus puissantes au monde.

LIVRES PARUS EN 2012



MESURE DU RAYONNEMENT ALPHA

Coordonnateurs : E. ANSOBORLO (CEA–Marcoule), J. AUPIAIS, N. BAGLAN (CEA–DAM Île-de-France)

Éditions Lavoisier Tec & Doc, 186 pages / ISBN : 9782743014148

Utilisé dans le domaine médical, présent dans l'industrie militaire ou encore électronucléaire, le rayonnement alpha constitue un des principaux rayonnements dont la détection et la mesure sont primordiales, que ce soit pour le contrôle de l'environnement, le suivi de toute opération technique industrielle ou la mesure de l'impact de la radioactivité sur la santé. Cet ouvrage rassemble les connaissances de base, aussi bien pratiques que théoriques, ainsi que toutes les recommandations nécessaires à tout opérateur, technicien ou ingénieur souhaitant utiliser la spectrométrie alpha comme méthode d'analyse quantitative et qualitative tout en lui évitant tout écueil méthodologique et biais expérimental. Il apporte ainsi des informations dans le domaine :

- ▶ de la préparation des sources pour la mesure par spectrométrie alpha ;
- ▶ de la mise en oeuvre des mesures pour chaque technique : compteur proportionnel, spectrométrie alpha avec semi-conducteur, chambre à grille et scintillation liquide ;

- ▶ du traitement et de l'expression des résultats ;
- ▶ de l'assurance de la qualité.

Ainsi, cet ouvrage synthétise le savoir-faire des laboratoires dans la fabrication des sources minces en donnant les règles simples, mais nécessaires, ainsi que des informations permettant d'appréhender les limites physiques et chimiques des sources minces. Il liste les techniques relatives à la détection des particules alpha en décrivant, pour chacune d'elles, la sensibilité, les avantages et inconvénients, le champ d'action. Ce livre apporte de manière aussi simple que possible les outils mathématiques requis pour déconvoluer les spectres selon les techniques employées et donne des exemples de traitement qui permettent d'appréhender la complexité des cas rencontrés. Il fournit à l'utilisateur les bases pratiques et théoriques indispensables à la production de résultats fiables et validés. Il inclut et discute les dernières réflexions dans le calcul des seuils de décision et limites de détection.



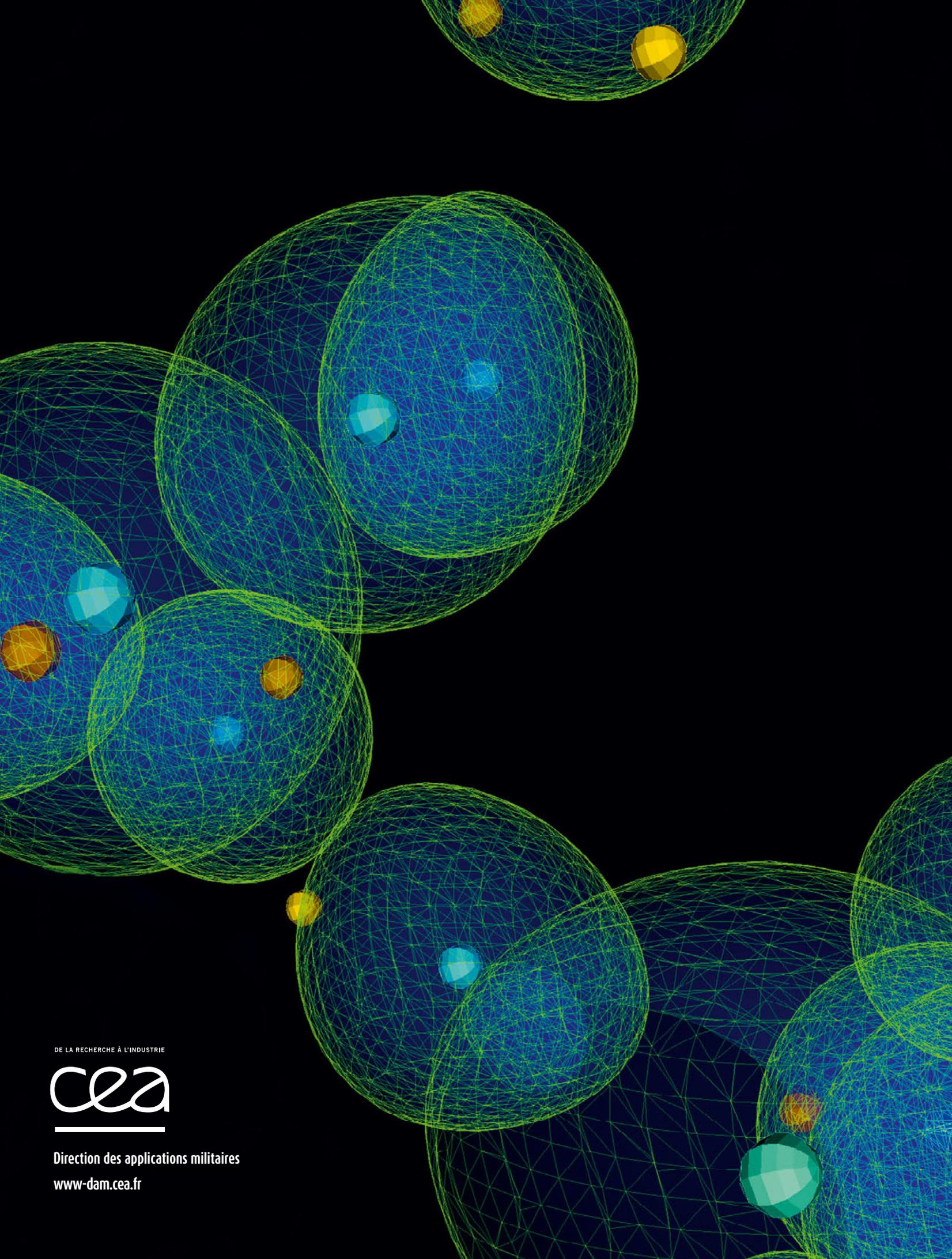
PHYSIQUE APPLIQUÉE À L'EXPOSITION EXTERNE : DOSIMÉTRIE ET RADIOPROTECTION

Par R. ANTONI (CEA – Cadarache) et L. BOURGOIS (CEA – DAM Île-de-France)

Éditions Springer / ISBN : 978-2-8178-0310-4, 467 pages

Cet ouvrage fait la synthèse de nombreuses années d'expériences dans le domaine de la dosimétrie externe et des techniques de protection contre ce type d'exposition aussi bien dans les domaines industriels, de la recherche et du médical. Il rappelle les concepts physiques de base, aborde une large part à la dosimétrie pour enfin proposer un certain nombre d'outils pour évaluer les nuisances radiologiques, les moyens de s'en prémunir, en particulier en calculant les blindages appropriés. Il est fondé sur la théorie liée à l'interaction des rayonnements ionisants avec la matière, des formules empiriques, des abaques et illustré par de nombreuses applications numériques. En outre, il fait référence en permanence à l'état de l'art et notamment dans le domaine des codes de calcul pour l'exposition externe et d'un certain nombre de projets médicaux et de recherche récents. Concernant l'agencement du contenu, le premier chapitre traite de la définition des grandeurs radiométriques et dosimétriques fondamentales, permettant d'aborder l'interaction rayonnement matière sous un angle dédié au dépôt de la dose dans les tissus

biologiques au travers du second chapitre, pour enfin définir et appliquer les grandeurs de protection et opérationnelles liée à la radioprotection au sein d'un troisième chapitre. Un accent particulier a été porté, dans les deux chapitres suivants, quant à la définition des risques et contre-mesures associées (i.e. protections biologiques) inhérents aux sources de rayonnements usuelles : radionucléides, générateurs X, accélérateurs (électrons, ions)... mais également pour des dispositifs plus « exotiques » dont certains sont liés à des domaines en expansion ou d'avenir tels les lasers de puissance... pour un domaine d'énergies que l'on peut qualifier de moyennes (0 à 200 MeV). Un chapitre en fin d'ouvrage est entièrement consacré aux codes de calculs de transport de particules exploitant la méthode Monte-Carlo. Les principes généraux y sont explicités avec une orientation particulière vers l'estimation de grandeurs radiométriques et dosimétriques décrites dans les chapitres antérieurs. Cette partie est là encore jalonnée d'applications numériques permettant d'éclaircir certaines thématiques.



DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE



Direction des applications militaires

www-dam.cea.fr