

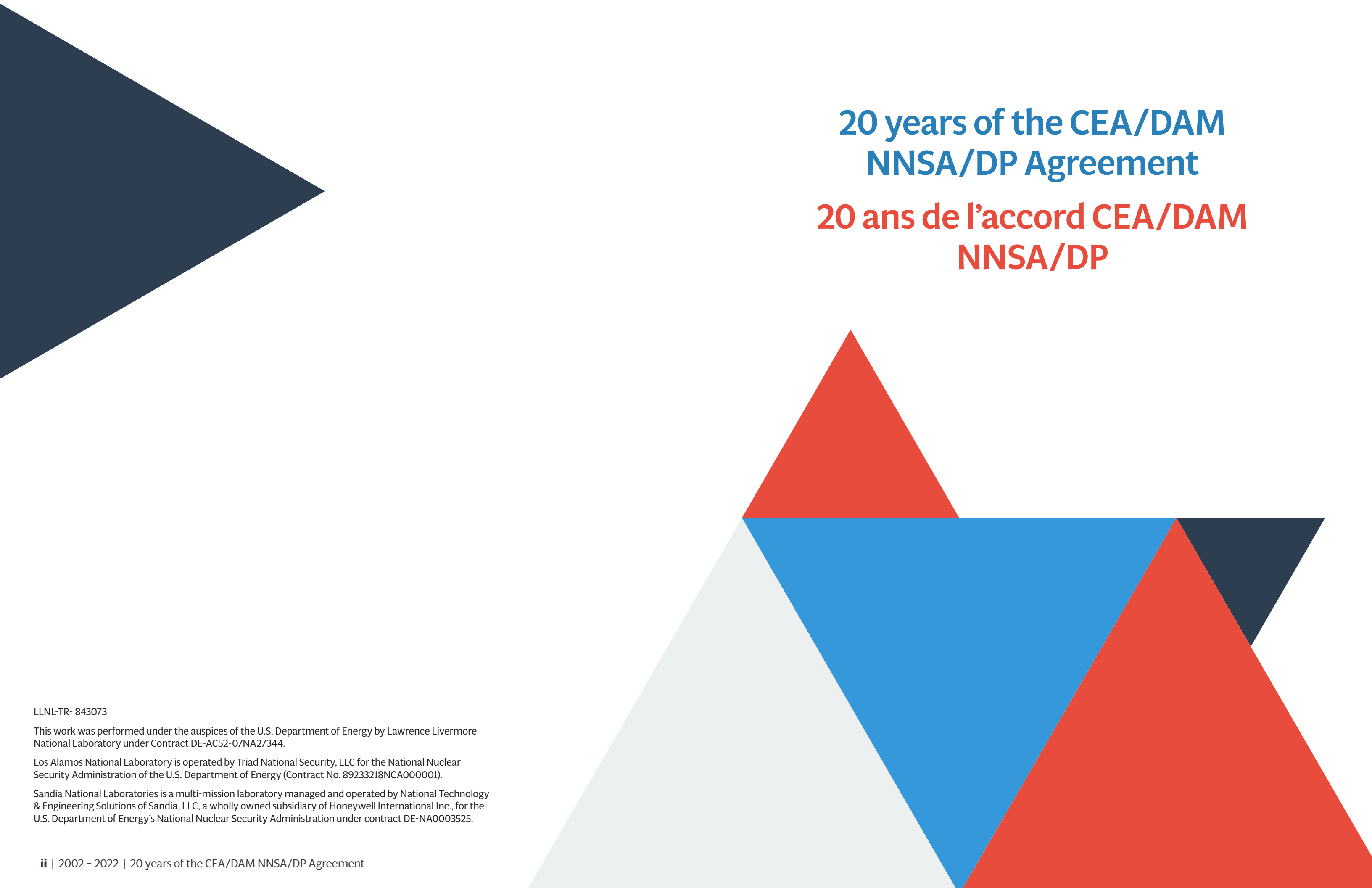
2002-2022

20

years / ans

20 years of the CEA/DAM NNSA/DP Agreement
20 ans de l'accord CEA/DAM NNSA/DP





**20 years of the CEA/DAM
NNSA/DP Agreement**

**20 ans de l'accord CEA/DAM
NNSA/DP**

LLNL-TR- 843073

This work was performed under the auspices of the U.S. Department of Energy by Lawrence Livermore National Laboratory under Contract DE-AC52-07NA27344.

Los Alamos National Laboratory is operated by Triad National Security, LLC for the National Nuclear Security Administration of the U.S. Department of Energy (Contract No. 89233218NCA000001).

Sandia National Laboratories is a multi-mission laboratory managed and operated by National Technology & Engineering Solutions of Sandia, LLC, a wholly owned subsidiary of Honeywell International Inc., for the U.S. Department of Energy's National Nuclear Security Administration under contract DE-NA0003525.

Introduction

For the past twenty years, there has been a very active, productive International Agreement between France and the United States of America for Cooperation on Fundamental Science supporting Stockpile Stewardship. Under this Agreement the scientists at the nuclear weapons laboratories in both countries have collaborated on many unclassified research projects in areas such as Materials in Extreme Conditions, Nuclear Physics, and Atomic and Plasma Physics. The results of their efforts have not only been published in the open literature but have enhanced the physics base of the computer codes essential to the mission of ensuring that the nuclear stockpiles are safe, secure and effective.

Work on these collaborations is extremely important. Not only does such joint work bring more brilliant minds to work on pressing research problems for both countries but also the collaborative effort sharpens the scientific skills of and presents scientific challenges to the scientific and technical staff of the laboratories.

As we reach the 20th Anniversary of the formal signing of the Agreement, we feel it is important to thank all of the individuals who have contributed to its continuing success. Our expectations for brilliant, exciting, challenging joint research projects under this Agreement are at an all-time high. We toast the achievement of this milestone and look forward to the research results to come.

History of the Agreement

In 1998, there was interest in both France and the United States in “reinforcing the collaboration” between the scientists at the weapons laboratories in each country. To that end, Jacques Bouchard, the Director of CEA/DAM sent Daniel Gogny to LLNL to explore the possibilities of collaborative efforts in unclassified research. Partly as a result of Dr. Gogny’s efforts, Director Bouchard wrote in January 2000 to both Bruce Tarter and John Browne, the Directors of LLNL and LANL in the U.S. suggesting that a formal collaboration be established. That suggestion was driven by the realization that the “spectacular advances in computational technology offer new prospects in the use of more fundamental physics than in the past.” Jacques Bouchard proposed meetings between representatives of the U.S. Laboratories and Jean Lachkar, of CEA/DAM – Île-de-France and Daniel Gogny to review what physics areas were appropriate for such collaborative efforts. In March 2000, Brigadier General Thomas Gioconda, the Acting Deputy Administrator for Defense Programs of the U.S. DOE, answered Director Bouchard saying that the “DOE and the laboratories would value such an interchange”

and suggested that an unclassified basic science cooperative agreement be established covering such topics “as nuclear science, condensed matter physics and materials science and atomic and plasma physics.” As with other collaborative efforts, this activity was to be conducted under a government-to-government agreement.

Meetings ensued to ascertain what specific areas of research held the most promise. A seminal meeting was held at Bruyères-le-Châtel in October 2000 involving almost 30 leaders from CEA/DAM and the DOE/NNSA weapons laboratories. In February 2001, a Workshop on Potential Collaborations in Nuclear Physics was held followed by one on Materials Science in February 2002 and one on Atomic and Plasma Physics in April 2002. The Agreement was written, approved and formally signed on March 13, 2002 by Alain Delpuech, Director of CEA/DAM, and John Gordon, the Administrator of the DOE/NNSA.

The Agreement covers Cooperation on Fundamental Science Supporting Stockpile Stewardship and is managed by a Steering Committee with two Co-Chairs, two Management Point- of-Contacts (MPOC’s) and a Technical Coordinator(s) at each laboratory. Since the Agreement was signed, a number of distinguished individuals have worked very hard to help manage the Agreement. At this time, the Co-Chairs are Olivier Vacus, Scientific Director of CEA/DAM and Njema Frazier, (Acting)Assistant Deputy Administrator for Strategic Partnerships Stewardship of the NNSA. The MPOC’s are David Riz (CEA/DAM) and Michael Kreisler (NNSA) with Thomas Mattsson (SNL), Jason Harke (LLNL), James Colgan (LANL) and Cyrille De Saint Jean (CEA/DAM) the Technical Coordinators. There have been roughly 125 proposals for collaborations. Many projects have been completed and 20-30 projects are active at any given time. Many joint publications have appeared in the open literature. At the 10th anniversary of the signing, a FOCUS journal was published celebrating that achievement (see https://www-physique-chimie.cea.fr/science-en-ligne/docs/chocs-focus/Focus_n3.pdf).

The Steering Committee meets annually. A General Meeting is held every two years at which each active project presents the status of and results from their research. These extremely interesting meetings alternate between sites in each country. In this journal, we celebrate the 20th Anniversary of the signing of the Agreement and present articles that describe many of the projects that have been active in the past ten years. The prospects for future collaborative efforts under this Agreement are truly spectacular. Long life to the Agreement!

—M. Kreisler (NNSA) & O. Vacus (CEA/DAM)

Introduction

Depuis 20 ans, un Accord de coopération internationale lie la France et les Etats-Unis dans le domaine des sciences fondamentales nécessaires au maintien de leurs capacités de dissuasion. Cet Accord particulièrement actif, souvent désigné « Accord Basic Science », est porté respectivement par la Direction des Applications Militaires du CEA (DAM) et la National Nuclear Security Administration du DOE (NNSA). Il a permis à de nombreux scientifiques des deux pays de prendre part à des dizaines de projets de recherche non classifiés dans les domaines de la physique des matériaux sous conditions extrêmes, la physique nucléaire et la physique des plasmas.

Les résultats issus de ces travaux de recherche menés en commun ont non seulement permis une production scientifique de qualité dans la littérature ouverte, mais ils ont aussi concouru au maintien de la sûreté, la sécurité et l’efficacité des armes nucléaires. Les bénéfices d’un tel Accord sont ainsi multiples. S’il offre aux deux pays l’opportunité d’associer leurs meilleurs chercheurs sur des points de physique fondamentale jugés particulièrement pertinents, il est aussi un lieu d’échanges et d’émulation scientifique privilégié entre des équipes avides de démontrer leurs capacités propres et leur savoir-faire.

Au moment de fêter le 20^e anniversaire de la signature officielle de l’Accord, nous tenons vivement à remercier toutes les personnes qui ont contribué à son succès et à sa longévité. Notre soutien, ainsi que nos attentes, demeurent intacts vis-à-vis des projets de recherche conjoints en cours ou à venir, projets qui sont ou seront à coup sûr aussi remarquables et stimulants que ceux que nous avons partagés jusqu’à aujourd’hui. Nous saluons comme il se doit cette étape majeure dans la vie de l’Accord et pensons déjà avec impatience aux avancées qui ne manqueront de survenir au cours de la prochaine décennie.

Accord de coopération « Basic Science », un peu d’histoire

En 1998, la France et les États-Unis ont manifesté un intérêt réciproque pour un renforcement des collaborations entre les scientifiques de leurs organismes respectifs en charge du maintien des capacités de dissuasion. Dans ce contexte, Jacques Bouchard, alors Directeur des Applications Militaires du CEA, a envoyé Daniel Gogny à Livermore pour identifier des possibilités de collaborations de recherche non classifiées. C’est notamment suite à cette mission de Daniel Gogny que Jacques Bouchard a écrit en janvier 2000 à ses homologues de Livermore et Los Alamos, Bruce Tarter et à John Browne, pour leur soumettre le projet d’une collaboration officielle. Ce projet était motivé par le constat que les avancées spectaculaires des moyens de calcul offraient aux sciences fondamentales un champ d’applications bien plus large que par le passé (*“spectacular advances in computational technology offer new prospects in the use of more fundamental physics than in the past”*). Jacques Bouchard a ensuite proposé que des représentants des laboratoires de la NNSA rencontrent Jean Lachkar, du centre DAM – Île-de-France, et Daniel Gogny pour décider ensemble quels domaines de la physique se prêteraient le mieux à des travaux menés en collaboration. En mars 2000, le brigadier-général Thomas Gioconda, administrateur adjoint par intérim des programmes de défense du

DOE, a répondu au DAM que le DOE et les laboratoires de la NNSA étaient favorables à de tels échanges. Il a suggéré qu’un accord de coopération non classifié soit établi relativement aux sciences fondamentales, c’est-à-dire couvrant des sujets tels que « la science nucléaire, la physique de la matière condensée et la science des matériaux et la physique atomique et des plasmas ». A l’image d’autres collaborations, il suggérait que cette nouvelle activité soit menée dans le cadre d’une entente de gouvernement à gouvernement.

Des réunions se sont alors tenues pour déterminer les domaines de recherche les plus appropriés. Une réunion décisive s’est tenue à Bruyères-le-Châtel en octobre 2000 avec près de 30 responsables de la DAM et des laboratoires de la NNSA. En février 2001, un workshop sur les collaborations potentielles en physique nucléaire a été organisé, suivi d’un atelier sur la science des matériaux en février 2002 et d’un atelier sur la physique atomique et des plasmas en avril 2002. L’Accord a été rédigé, approuvé et signé officiellement le 13 mars 2002 par Alain Delpuech, directeur du CEA/DAM, et John Gordon, administrateur du DOE/NNSA.

L’Accord couvre les travaux de recherche en coopération dans le domaine des sciences fondamentales utiles au maintien des capacités de dissuasion. Il est piloté par un comité directeur composé de deux coprésidents, de deux points de contact de la direction (MPoC, pour Management Point of Contact) et d’un Coordinateur Technique (CT) pour chaque laboratoire. De nombreuses personnes de valeur se sont succédées depuis la signature de l’Accord pour en assurer la bonne marche. A l’heure actuelle, les coprésidents sont Njema Frazier, Sous-Administratrice adjointe par intérim pour l’intendance des partenariats stratégiques de la NNSA, et Olivier Vacus, Directeur Scientifique du CEA/DAM. Les MPoC sont Michael Kreisler (NNSA) et David Riz (CEA/DAM), tandis que les CT sont respectivement Thomas Mattsson (SNL), Jason Harke (LLNL), James Colgan (LANL) et Cyrille De Saint Jean (CEA/DAM).

Depuis sa création, l’Accord a permis environ 125 projets en collaboration. Si la plupart d’entre eux sont aujourd’hui achevés, on constate en permanence 20 à 30 projets actifs simultanément. Tous ces projets ont donné lieu à une abondante littérature ouverte. À l’occasion du 10^e anniversaire de la signature de l’Accord, une revue FOCUS a été publiée par la DAM pour célébrer l’événement (voir https://www-physique-chimie.cea.fr/science-en-ligne/docs/chocs-focus/Focus_n3.pdf).

Le Comité directeur se réunit chaque année. Une assemblée générale a lieu tous les deux ans, au cours de laquelle chaque projet actif présente l’état d’avancement et les résultats de ses recherches. Ces rencontres extrêmement enrichissantes se déroulent alternativement dans chaque pays. Dans cette revue, nous célébrons le 20^e anniversaire de la signature de l’Accord et présentons une série d’articles qui rendent compte des nombreux projets actifs au cours des dix dernières années. Les perspectives offertes par cette coopération internationale n’ont rien perdu de leur attrait, au contraire, et on ne peut que souhaiter la poursuite des échanges et des travaux en collaboration pour encore de nombreuses années. Longue vie à l’Accord !

—M. Kreisler (NNSA) & O. Vacus (CEA/DAM)

Table of Contents

Table des Matières

Introduction	iv v	Introduction	Laser shock compression of hydrogen and helium to deep planetary conditions	34 35	Les intérieurs planétaires étudiés par des expériences sur l'hydrogène et l'hélium comprimés par laser
Fission cross section measurements for high specific activity actinides	02 03	Mesures de section efficace de fission pour les actinides à haute activité	Microscopic theory for inelastic scattering reactions	36 37	Théorie microscopique des réactions de diffusion inélastique
Prompt neutron and photon emission measurements in fission	04 05	Mesure des spectres et multiplicités de neutrons et gamma produits lors de la fission	Studies of electron beam propagation in gas-filled cells	38 39	Etude de la propagation d'un faisceau d'électrons sous atmosphère maîtrisée
Integral cross section measurement of the $^{235}\text{U}(n,n')^{235\text{m}}\text{U}$ reaction in a pulsed reactor	06 07	Mesure intégrale de la section efficace de réaction $^{235}\text{U}(n,n')^{235\text{m}}\text{U}$ dans un réacteur pulsé	Kinetics of phase transformations in metals under dynamic compression	40 41	Etude des cinétiques des transitions de phase dans les métaux sous sollicitations dynamiques
Collaborative exchanges of nuclear reaction algorithms and data	08 09	Collaboration sur les modèles de réactions nucléaires et les algorithmes associés	Fission product yield measurements	42 43	Mesures de rendement des produits de fission
Uncertainties and covariances in nuclear data, Application to plutonium	10 11	Incertitudes et covariances sur les données nucléaires, Application au plutonium	Time dependent study of materials under dynamic compression in a diamond anvil cell	44 45	Etude résolue en temps de matériaux sous compression dynamique en cellule à enclumes de diamant
Experimental study of the reaction zone of explosives	12 13	Etude expérimentale de la zone de réaction des explosifs	The use of deep learning in a simulation program	46 47	Utilisation de l'apprentissage statistique profond dans un programme de simulation
Radiative neutron capture cross sections on the Lu isotopes: $^{176,175,174,173}\text{Lu}$	14 15	Sections efficaces de capture radiative des neutrons sur les isotopes Lu : $^{176,175,174,173}\text{Lu}$	Pressure measurements in high explosives	48 49	Mesures de pression dans les explosifs
Electromagnetic cascade in Monte Carlo codes and radiography	16 17	Intercomparaison de codes Monte Carlo et radiographie	Methodologies for accurate determination of the refractive index of materials in the x-ray spectral range	50 51	Méthodologie pour la détermination précise de l'indice de réfraction des matériaux dans le domaine spectral des rayons X
Stellar interior opacities	18 19	Opacités internes des étoiles	Glossary	52 - 53	Glossaire
Validating the surrogate technique for (n,γ)	20 21	Validation de la technique de mesure par réaction de transfert pour la capture radiatives	References	54 - 59	Références
Thermodynamic study of actinide alloys	22 23	Etude thermodynamique d'alliages d'actinides	Acknowledgements	60	Remerciements
Orbital free simulation of hot dense matter	24 25	Simulation de la matière dense et chaude par les codes sans-orbitales			
Effects of whistler waves in the near-Earth environment	26 27	Effets des ondes de mode siffleur dans l'espace proche de la Terre			
Simulating nuclear fission dynamics	28 29	Simulation de la dynamique de la fission nucléaire			
Measurement of short-lived isomers in the radiative capture and fission reactions	30 31	Mesures d'isomères à vie courte produits lors des réactions de fission et de capture radiative			
Additive manufacturing for basic shock wave physics	32 33	Fabrication additive pour la physique de base des ondes de choc			

FISSION CROSS SECTION MEASUREMENTS FOR HIGH SPECIFIC ACTIVITY ACTINIDES

CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay A. Chatillon, B. Mauss, P. Morfouace, J. Taïeb

Los Alamos National Laboratory M. Devlin, K. J. Kelly

The measurement of the fission cross section of ^{238}Pu , relatively to the one of the ^{235}U isotope, for an energy range from threshold at 0.7 MeV up to 25 MeV is a long-standing discussed issue in the framework of the DAM collaboration [Gra09]. As shown in Figure 1 presenting the existing data, the disagreement is obvious between the different experiments and evaluations. Indeed, the very high alpha activity of ^{238}Pu ($T_{1/2} = 87.7$ years) makes this measurement particularly difficult.

However, recent developments on fission chambers for the measurement of prompt fission neutron spectra at WNR, showing excellent alpha/fission discrimination, allow to restart this project. A $^{238}\text{Pu}/^{235}\text{U}$ multibody fission chamber from this new generation, will be placed in a white spectrum neutron

beam, thus covering a wide range of incident neutron energies with a single set-up and experiment. A first experiment will be proposed at the LANSCE/WNR facility. Its aim will be to qualify the experimental device in real conditions on the measurement of the effective fission cross section of ^{242}Pu . Even if this measurement is much more accessible since its specific alpha activity is lower ($T_{1/2} = 3.75\text{E5}$ years), Figure 2a shows that disagreements remain around 8 MeV. Moreover, for the fission cross section of ^{240}Pu (cf. Figure 2b), the data sets and evaluations diverge from 8 MeV. A second experiment will therefore be carried out, with a higher activity ($T_{1/2} = 6561$ years) to obtain a precise measurement of the cross section of ^{240}Pu , before proposing the final measurement of ^{238}Pu .

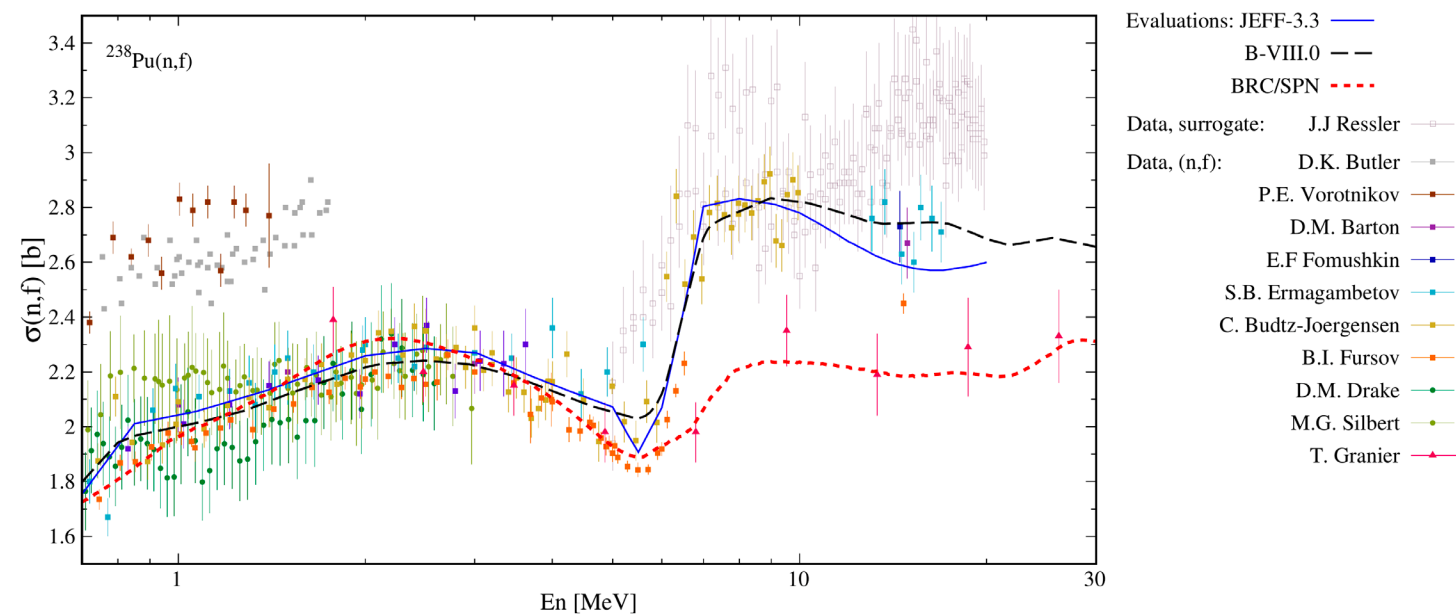


Figure 1
Comparison of the measurements and evaluations of the ^{238}Pu fission cross section.

Comparaison des mesures et des évaluations de la section efficace de fission du ^{238}Pu .

MESURES DE SECTION EFFICACE DE FISSION POUR LES ACTINIDES À HAUTE ACTIVITÉ

A. Chatillon, B. Mauss, P. Morfouace, J. Taïeb CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay

M. Devlin, K. J. Kelly Los Alamos National Laboratory

La mesure la section efficace de fission du ^{238}Pu , relativement à la section efficace de fission du ^{235}U pour une gamme d'énergie allant du seuil, de 0.7 MeV jusqu'à 25 MeV est une problématique de longue date dans le cadre de la collaboration DAM/NNSA [Gra09]. Comme le montre la Figure 1 présentant les données existantes, le désaccord est flagrant entre les différentes expériences et évaluations. En effet, la très haute activité spécifique alpha du ^{238}Pu ($T_{1/2} = 87,7$ ans) rend cette mesure particulièrement difficile à réaliser.

Cependant, les développements récents sur les chambres à fission pour la mesure des spectres de neutrons prompts de fission à WNR, présentant une excellente discrimination alpha/fission, permettent d'ouvrir à nouveau ce projet. Une chambre à fission multicorps $^{238}\text{Pu}/^{235}\text{U}$, de nouvelle génération, sera placée dans un faisceau de neutrons polyénergétiques, couvrant ainsi avec un même dispositif une

large gamme en énergie de neutrons incidents. Une première expérience sera proposée auprès de l'installation LANSCE/WNR. Elle aura pour but de qualifier le dispositif expérimental en condition réelle sur la mesure de la section efficace de fission du ^{242}Pu . Même si cette mesure est bien plus accessible étant donné que son activité spécifique alpha est plus faible ($T_{1/2} = 3,75\text{E5}$ ans), la Figure 2a montre que des désaccords demeurent autour de 8 MeV. Une seconde expérience sera réalisée, avec une activité plus importante ($T_{1/2} = 6561$ ans) pour obtenir une mesure précise de la section efficace de ^{240}Pu . En effet, pour la section efficace de fission du ^{240}Pu (cf. Figure 2b), les jeux de données et les évaluations divergent à partir de 8 MeV. Finalement, nous proposerons la mesure de la section efficace de fission du ^{238}Pu dont l'activité spécifique est 2 ordres de grandeurs plus grandes.

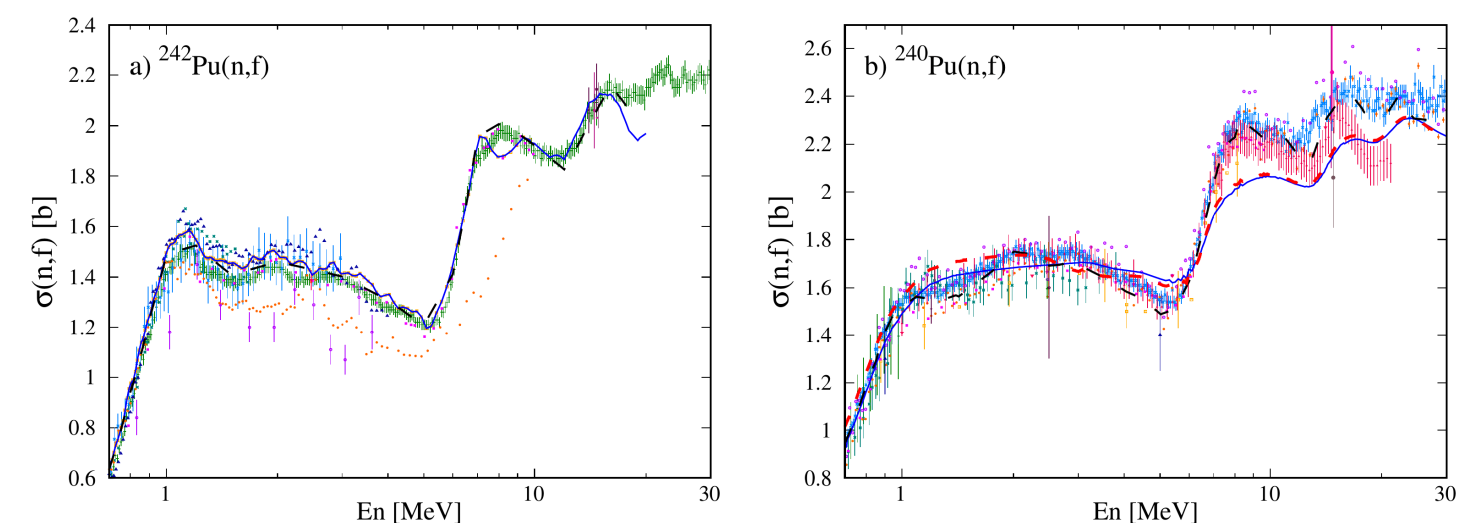


Figure 2
Comparaison des mesures (points) et des évaluations (lignes) des sections efficaces de fission des isotopes de ^{242}Pu (a) et ^{240}Pu (b).

Comparisons of the measurements (points) and evaluations (lines) of the fission cross sections for the ^{242}Pu (a) and ^{240}Pu (b) isotopes

PROMPT NEUTRON AND PHOTON EMISSION MEASUREMENTS IN FISSION

MESURE DES SPECTRES ET MULTIPLICITÉS DE NEUTRONS ET GAMMA PRODUITS LORS DE LA FISSION

CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay A. Chatillon, B. Mauss, P. Morfouace, J. Taïeb
Los Alamos National Laboratory M. Devlin, K. J. Kelly, R. Haight

The spectra of prompt fission neutrons, is indeed crucial to any simulation of a nuclear system based on a self-sustaining fission chain reaction. It is, in fact, the neutrons resulting from fission which will in turn interact with the fissile material to induce further fission. During the 2000s, the first experiments were carried out jointly using old-generation fission chambers, produced at the DAM, and the set of FIGARO neutron detectors developed jointly. The LANSCE/WNR broad-energy neutron beam is exploited. These first measurements provided interesting, quality data, which then fed international nuclear assessments. The precision achieved then was not in line with the application needs for this very important observable. As a result, LANL/LANSCE developed, during the following decade, a new experimental area totally dedicated to these measurements, and associated with a new set of 54 neutron detectors, called Chi-Nu. At the same time, the DAM has produced fission chambers of more recent technology, also specifically adapted to these

measurements of fission neutron spectra. This innovative equipment was combined during joint experiments carried out in 2017 and 2019. These experiments saw us study the fission neutron spectra of Pu239 and U235. The Pu239 data has been published recently. Those relating to uranium 235 are being finalized. LANL/LANSCE also performs similar measurements using another type of fission detector, called PPAC, and a different approach to data analysis. These data have also been published. An article dedicated to the comparison of the two sets of experimental data was published recently and highlights the excellent agreement between the two experiments and the major advance that these recent measurements represent compared to previous data. The DAM very recently developed a new set of 72 neutron detectors, VENDETA, with the aim of further improving the precision of these measurements. This new set is being deployed for the first time at LANSCE in the summer/ autumn of 2022 for an experiment on a uranium 238 target.

A. Chatillon, B. Mauss, P. Morfouace, J. Taïeb CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay
M. Devlin, K. J. Kelly, R. Haight Los Alamos National Laboratory

Les spectres de neutrons prompts de fission sont cruciaux à toute simulation de système nucléaire basé sur une réaction en chaîne de fission auto-entretenue. Ce sont, en effet, les neutrons issus de la fission qui vont à leur tour interagir avec la matière fissile pour induire d'autre fissions. Au cours de la décennie 2000, de premières expériences ont été réalisées en commun à l'aide de chambres à fission d'ancienne génération, produites à la DAM, et de l'ensemble de détecteurs neutrons FIGARO développé en commun. Le faisceau de neutrons polycinétique WNR du LANSCE est exploité. Ces premières mesures ont fourni des données de qualité, qui ont alors alimenté les évaluations internationales. La précision atteinte n'était cependant pas suffisante pour les besoins applicatifs. Le LANL/LANSCE a alors développé, au cours de la décennie suivante, une nouvelle aire expérimentale totalement dédiée à ces mesures, et associée à un nouvel ensemble de 54 détecteurs neutrons appelé Chi-Nu. Dans le même temps, la DAM a élaboré des chambres à fission de technologie plus récentes, spécifiquement adaptées aux mesures de spectres de neutrons de fission [Taï16,

Lau21]. Ces équipements innovants ont été combinés au cours d'expériences communes menées en 2017 et 2019. Ces expériences étaient dédiées aux mesures de spectres en neutrons de fission du Pu239 et l'U235. Les données Pu239 ont été publiées récemment (ou en cours de publication) [Mar20, Mar22] alors que celles relatives à l'uranium 235 sont en cours de finalisation. Le LANL/LANSCE réalise aussi des mesures similaires à l'aide d'un autre type de détecteurs de fission, appelé PPAC, et une analyse de données à l'approche différente. Ces données ont aussi été publiées [Kel22, Kel20]. Un article dédié à la comparaison des deux jeux de données expérimentaux a été publié récemment [Kel21] et met en exergue l'excellent accord entre les deux expériences et l'avancée majeure que constituent ces mesures récentes par rapport aux données antérieures. La DAM a très récemment développé un nouvel ensemble de 72 détecteurs neutrons, VENDETA, avec pour objectif d'améliorer encore la précision de ces mesures. Ce nouvel ensemble est déployé pour la première fois au LANSCE à l'été/automne 2022 pour une expérience sur cible d'uranium 238.

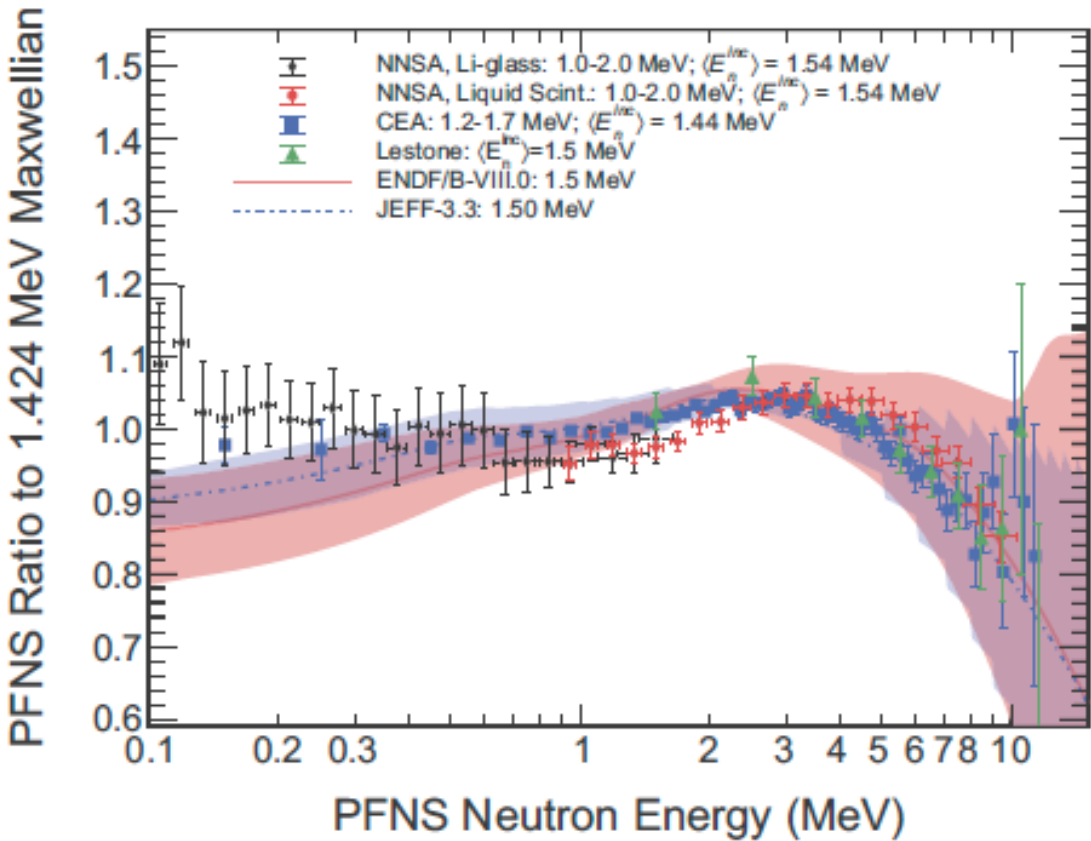


Figure 1
A comparison of CEA (full, blue squares) and NNSA (Li-glass data shown as full, black diamonds and liquid scintillator data shown as full, red circles) PFNS results at $E_{inc} \approx 1.5$ MeV. Evaluations from ENDF/B-VIII.0 and JEFF-3.3 are shown for comparison (red and blue lines, respectively) alongside the data of Lestone and Shores, shown as the green triangles. All spectra are shown as a ratio to a 1.424 MeV Maxwellian distribution.

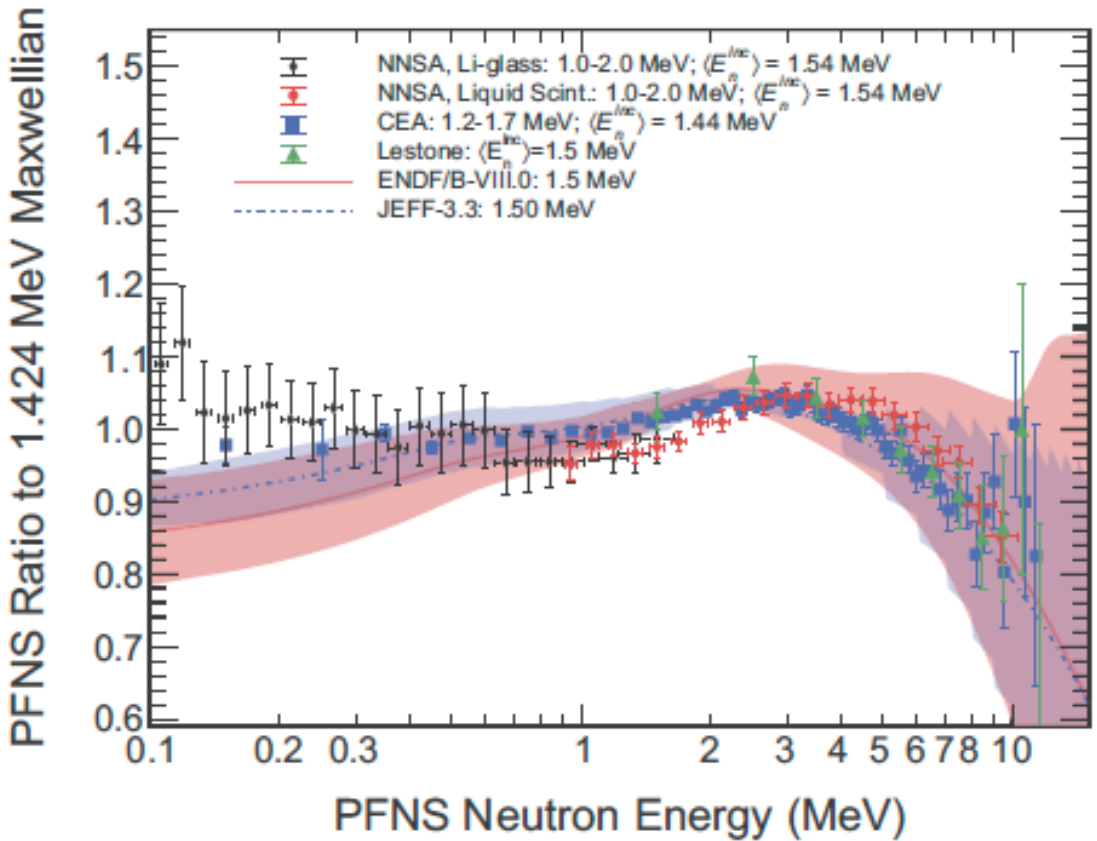


Figure 1
Comparaison pour $E_{inc}=1.5$ MeV des résultats du CEA (carrés bleus pleins) et de NNSA (cercles noirs et rouges pleins). Les évaluations de ENDF/B-VIII.0 et JEFF-3.3 sont présentées à des fins de comparaison (lignes rouges et bleues, respectivement) à côté des données de Lestone et Shores, représentées par des triangles verts. Tous les spectres sont présentés sous forme de rapport à une distribution maxwellienne de 1,424 MeV.

INTEGRAL CROSS SECTION MEASUREMENT OF THE $^{235}\text{U}(\text{n},\text{n}')^{235\text{m}}\text{U}$ REACTION IN A PULSED REACTOR

CEA-DAM: Île de France, Valduc

Los Alamos National Laboratory
Lawrence Livermore National Laboratory

In the application of nuclear fission every processes are important for reactivity calculations. In some situations, excited states need to be considered. In the case of ^{235}U , the fission cross section for the first excited state, the 26 minutes isomer, exceeds that of the ground state fission cross section by a factor ~ 2 at thermal neutron energies. Conversely at about 300 keV it is predicted to be 20-50% smaller than that of the ground state.

An integral measurement of the neutron inelastic scattering cross section leading to the $^{235\text{m}}\text{U}$ isomer was performed by CEA at the pulsed critical reactor CALIBAN (CEA/VALDUC France) [Bél15]. The number of isomeric nuclei produced in an irradiation was measured with a dedicated electron detector specifically designed for the detection of low-energy $^{235\text{m}}\text{U}$ conversion electrons.

The measurements consisted of irradiating a ^{235}U sample, separating uranium from fission products, and counting the isomer decay. The detection efficiency, the measured half-life and the measured activity were used in order to deduce the amount of isomer produced in the irradiation. The neutron

G. Bélier, V. Méot, P. Romain, N. Authier, D. Hyneck, X. Jacquet, Y. Jansen, J. Legendre
E. M. Bond, D. J. Vieira
J. A. Becker, R. Macri

fluence was determined by co-irradiating In samples and by measuring the activation of $^{115\text{m}}\text{In}$ formed through the (n,n') reaction. This measurement was repeated several time in order to minimize the final uncertainty.

The obtained value of the integral $^{235}\text{U}(\text{n},\text{n}')^{235\text{m}}\text{U}$ cross section is 1.00 ± 0.13 barns. An evaluation performed with the TALYS-1.4 code is presented in Figure 1 (dotted curve). When averaged over the CALIBAN neutron energy spectrum (dashed-dotted curve in Figure 1), a value of 0.97 barns is obtained, in good agreement with our measurement. The integrated value of the evaluated total inelastic cross section (full curve in Figure 1) is 1.66 barns. Hence the isomer production is calculated to exhaust 58% of the total inelastic cross section. With such value the uncertainties associated to the γ cascade calculation necessary to obtain the total inelastic cross section, are much lower compared to the uncertainties obtained in $(\text{n},\text{n}')^{\gamma}$ where the most intense γ -rays represents only 10% of the total cascade. Thus the measurement of the partial (n,n') feeding the isomer provides a strong constrain to the total inelastic cross section modelling.

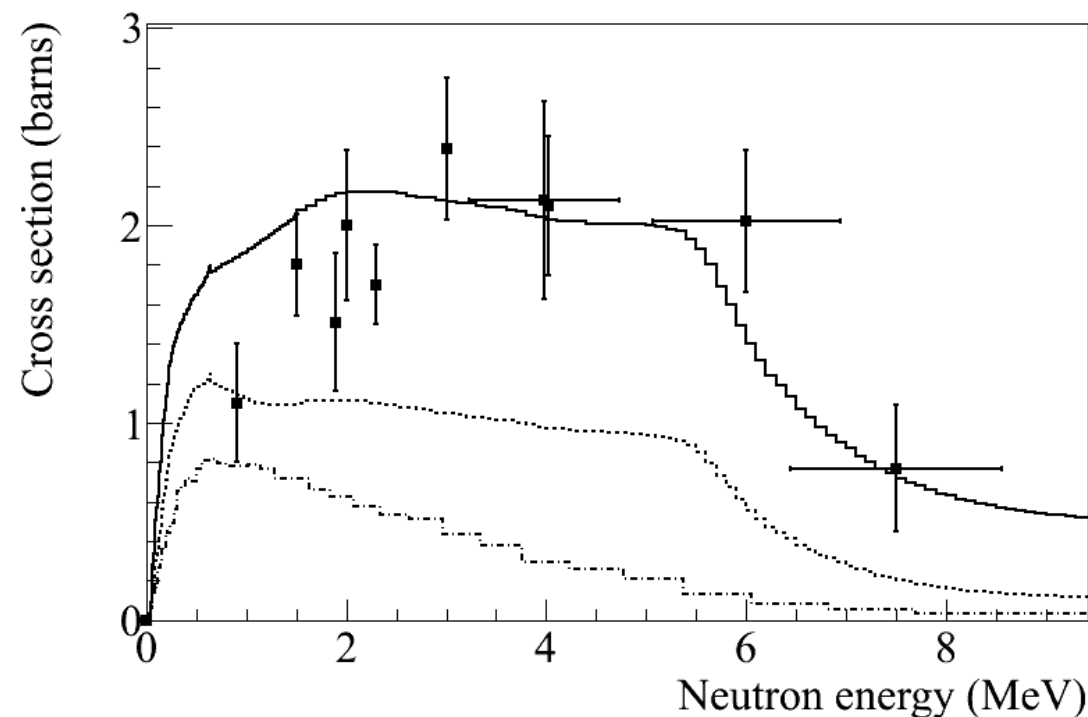


Figure 1
Total neutron inelastic cross section against neutron energy. Square symbols: experimental data points. Full line: total cross section calculated with TALYS-1.4. Dashed line: Partial isomer excitation calculated with TALYS. Dash-dotted line: CALIBAN neutron spectrum.

MESURE INTÉGRALE DE LA SECTION EFFICACE DE RÉACTION $^{235}\text{U}(\text{n},\text{n}')^{235\text{m}}\text{U}$ DANS UN RÉACTEUR PULSÉ

G. Bélier, V. Méot, P. Romain, N. Authier, D. Hyneck, X. Jacquet, Y. Jansen, J. Legendre
E. M. Bond, D. J. Vieira
J. A. Becker, R. Macri

Dans les applications de la fission toutes les réactions interviennent dans un calcul de réactivité. Parfois les états nucléaires excités doivent être considérés. Le premier niveau isomère de l'uranium 235 est connu [Bél15] pour avoir une section efficace de fission deux fois plus élevée que l'état fondamental en neutron thermiques. Aux alentours de 300 keV des calculs prédisent cette section efficace 20 à 50% plus faible que celle du fondamental.

Une mesure intégrale de la section efficace partielle $^{235}\text{U}(\text{n},\text{n}')^{235\text{m}}\text{U}$ a été réalisée par le CEA auprès du réacteur critique pulsé CALIBAN (CEA/VALDUC France)[1]. La mesure de l'activation de l'isomère était réalisée à l'aide d'un détecteur dédié à la mesure des électrons et spécifiquement adapté à la détection des électrons de conversions de basses énergie de l' ^{235}U . Les mesures consistaient à irradier des échantillons d'uranium 235 et à séparer chimiquement l'uranium des produits de fission avant la mesure d'activation. L'efficacité de détection, la durée de vie mesurée et la décroissance mesurée de l'isomère permettent ensuite de déterminer la quantité d'isomère produite pendant l'irradiation. La

CEA-DAM: Île de France, Valduc

Los Alamos National Laboratory
Lawrence Livermore National Laboratory

fluence neutronique était obtenue en co-irradiant des pastilles d'indium et en mesurant l'activation du $^{115\text{m}}\text{In}$. Ces irradiations ont été répétées plusieurs fois afin de minimiser l'incertitude finale.

La section efficace intégrale $^{235}\text{U}(\text{n},\text{n}')^{235\text{m}}\text{U}$ obtenue est $1,00 \pm 0,13$ barns. Une évaluation effectuée avec TALYS-1.4 est présentée Figure 1 (pointillés). La valeur moyennée dans le spectre CALIBAN, est de 0,97 barns, en très bon accord avec notre mesure. La valeur moyenne de la section efficace inélastique totale de diffusion inélastique vaut 1,66 barns. Ainsi la production de l'isomère représente 58% de la section efficace de diffusion inélastique. Avec une telle valeur, les incertitudes associées aux calculs de cascades γ nécessaires pour obtenir la section efficace totale sont plus faibles que pour les mesures de section efficaces partielles $(\text{n},\text{n}')^{\gamma}$. En effet les raies γ les plus intenses mesurées représentent seulement 10 % de la cascade. La mesure de la section efficace partielle de formation de l'isomère est donc un moyen fort de contraindre les calculs de sections efficaces inélastiques totales.

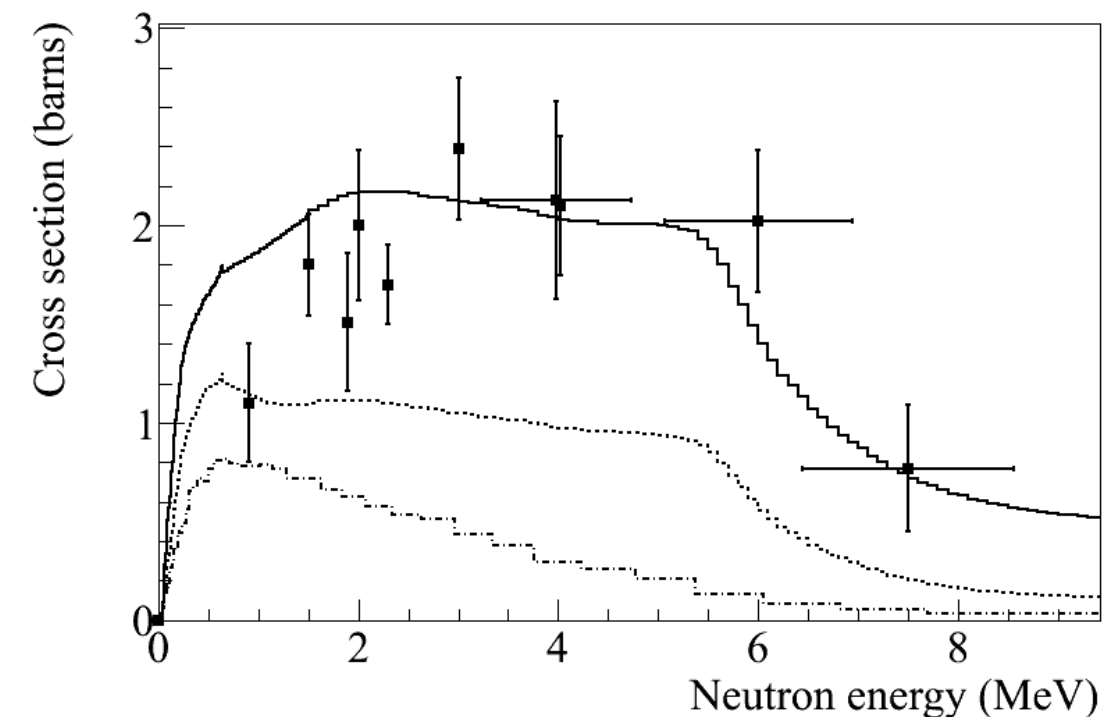


Figure 1
Section efficace totale de diffusion inélastique de neutron en fonction de l'énergie des neutrons. Symboles carrés : points expérimentaux. Trait plein : calcul réalisé avec TALYS-1.4. Trait pointillés : excitation de l'isomère calculée avec TALYS. Trait pointillés-tirets : spectre CALIBAN.

Modeling nuclear reactions requires a detailed description of numerous mechanisms such as direct reactions, the pre-equilibrium emission, the formation and decay of a compound nucleus and the fission process. Depending on the projectile, the target and the energies, different reaction scenarios are possible. In particular, the emission of particles such as neutrons, gamma-rays and light charged particles can occur after one or more of these mechanisms at different stages of the reaction. There exists several computer codes for nuclear reaction models, which comprehensively describe these mechanisms as well as their inter-connection. By providing several important ingredients in these models, such as level densities, optical potentials, photon strength functions, low energy discrete levels scheme, etc., these model codes give various nuclear reaction cross sections for many important applications through the decay of the compound nucleus and the pre-equilibrium emission. The aim of this collaborative effort is to investigate the various ingredients as well as the hypotheses used in the description of various reaction mechanisms to move towards a more predictive description of the nuclear reaction, with a particular emphasis on the neutron-induced reactions. In this context, the in-depth analysis of reaction modeling was performed by comparing with the most recent experimental data of $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$. The impact of various prescriptions in pre-equilibrium and compound nucleus decay modeling (see Figure 1) and the description of discrete nuclear levels were analyzed and discussed in our recent publication [Ke2020]. These comparison to the partial (n,n') data led to a refinement

of modeling and improve the calculation of total inelastic scattering cross section for which experimental data are scarce albeit crucial for various energy applications. We have been extending this work to the (n,n'γ) gamma reactions on $^{182,184,186}\text{W}$, where the data analysis primarily focuses on some aspects of the modeling such as the optical potential, the low energy components of the gamma-ray strength functions (e.g. M1 scissors mode, E1/M1 upbend components at very low energies), and the spin and parity distributions in the level densities. In addition to the comprehensive nuclear reaction calculations, a joint work is in progress, which particularly focuses on pre-equilibrium modeling of neutron induced reaction. The neutron inelastic scattering process to the continuum leaves a residual nucleus at an excited state that is characterized by a distribution in spin and parity. Microscopic modeling of this inelastic process and spin/parity distributions was developed in both LANL and CEA-DAM on the basis on various assumptions at different levels of complexity. Both models provide reasonably similar spin-distributions that depart from previously accepted values but that were shown to be more realistic [Ka2007]. This common work was presented at the ND2022 conference [Du2022]. A joint article is under preparation; it will provide the analysis of spin distributions over a wide range of the nuclear mass table for better prediction of the gamma-ray production in the inelastic scattering process. The systematic formulation of spin distribution, constrained by microscopic approaches, will be discussed as it may be of great interest to large-scale analyses of nuclear data.

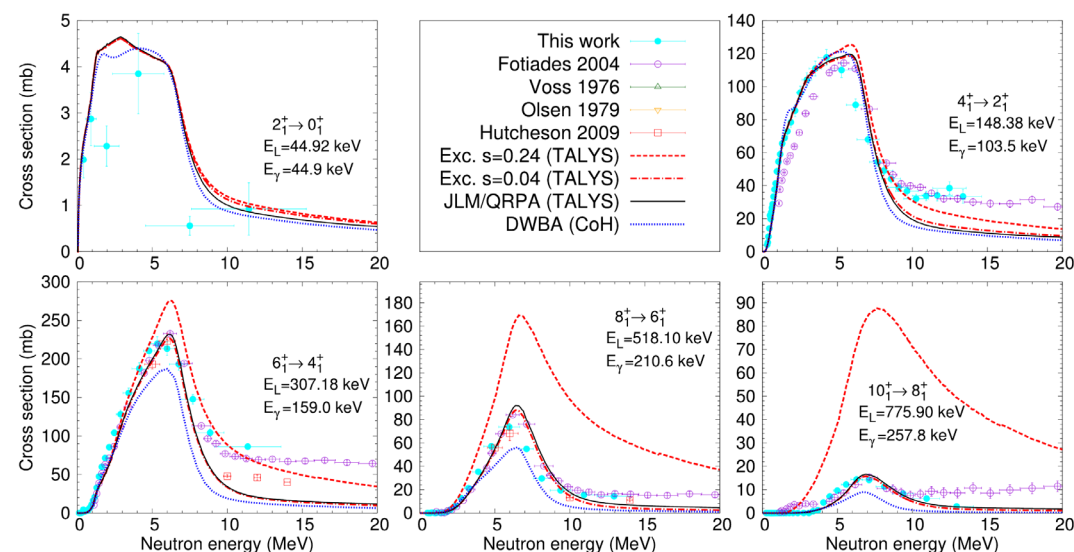


Figure 1
 $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ cross sections compared to calculations with various pre-equilibrium models.

La modélisation des réactions nucléaires nécessite la description de nombreux mécanismes tels que les réactions directes, l'émission de pré-équilibre, la formation et la désintégration d'un noyau composé et le processus de fission. En particulier, l'émission de particules telles que les neutrons, les rayons gamma et les particules chargées fait intervenir un ou plusieurs de ces mécanismes à différents stades de la réaction. Afin de déterminer et calculer ces sections efficaces de réaction, il est nécessaire d'utiliser des ingrédients importants, tels que les densités de niveau, les potentiels optiques, les fonctions de force gamma, les schémas de niveaux discrets à faible énergie, etc... L'objectif de cet effort collaboratif est d'étudier ces différents ingrédients ainsi que les hypothèses utilisées dans la description des différents mécanismes de réaction pour avancer vers une description plus prédictive des réactions nucléaire, avec un focus sur les réactions induites par les neutrons. Dans ce contexte, une analyse approfondie des modèles des réactions a été effectuée en comparant leurs prédictions aux données expérimentales de $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ les plus récentes. L'impact de diverses prescriptions dans la modélisation du pré-équilibre et de la désintégration du noyau composé (voir Figure 1) et la description des niveaux nucléaires discrets ont été discutés [Ke2020]. Cette confrontation théorie/expérience sur des données rares a permis d'affiner la modélisation et d'améliorer

le calcul de la section efficace totale de diffusion inélastique (réaction cruciale pour diverses applications énergétiques). Une extension de ce travail aux réactions (n,n'γ) des noyaux de $^{182,184,186}\text{W}$ a été faite en se concentrant sur la modélisation du potentiel optique, des composantes à faible énergie des fonctions de force gamma, et les distributions de spin et de parité dans les densités de niveaux. Plus récemment, un travail conjoint se concentre sur la modélisation du pré-équilibre de la réaction induite par neutron et le processus de diffusion inélastique de neutrons en utilisant une modélisation microscopique (avec une estimation de l'impact sur les distributions en spin et en parité). Des développements à la fois au LANL et au CEA-DAM (avec des hypothèses et des niveaux de complexité différents) ont fourni des distributions de spin similaires plus réalistes et s'écartant des valeurs traditionnellement acceptées [Ka2007]. Ce travail, présenté à la conférence ND2022 [Du2022], fait l'objet d'un article en préparation. L'analyse d'une large gamme de noyaux sphériques et déformés permet une meilleure description de la production de rayons gamma dans le processus de diffusion inélastique et donnera lieu à une formulation systématique de la distribution de spin, contrainte par des approches microscopiques, d'un grand intérêt pour les analyses de données nucléaires à grande échelle.

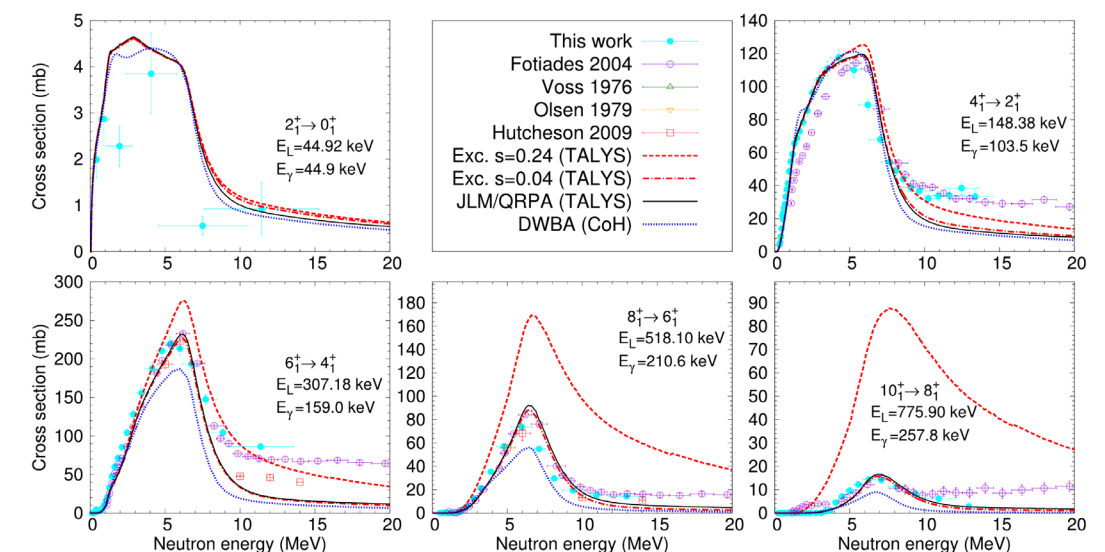


Figure 1
Comparaisons de mesures de sections efficaces $^{238}\text{U}(n,n'\gamma)$ à plusieurs modèles de pré-équilibre.

The estimation of biases and uncertainties in nuclear physics is an activity of increasing interest. In particular, for the evaluation of nuclear data, various methods have been implemented within the framework of the DAM/NNSA collaboration in order to provide data with uncertainties. This important evolution is accompanied by new problems to be solved and paths of progress to be implemented. They can be classified according to the following main types: problems related to the size of the data to be used and/or the associated calculation times, estimation of uncertainties and biases resulting from microscopic calculations, propagation of those microscopically-based uncertainties to phenomenological models and their parameter uncertainties towards more applicative scale levels and finally definition of the domains of application where such approximations are valid. For this last point, the use of integral experiments remains an important issue due to the significant reduction of the uncertainties they induce **[Baug18, Roch17, Roch21]**.

For the nuclear data evaluation, the main advances focused firstly on the use of robust mathematical methods such as Bayesian inference to estimate uncertainties in the evaluation

of fission yields, prompt neutron multiplicities and spectra as well as cross sections **[Regn21, Love21, Okum22, Neud19, Neud22]**. Important applications for the neutron-induced reactions on ^{239}Pu will be explored in the future.

This synthesis of theoretical and experimental knowledge and its use in applications requires reducing uncertainties and eliminating lifting error compensations. Three complementary approaches are being pursued: (1) the design and analysis of increasingly precise and discriminating measurements (such as those initiated in the DAM/NNSA P104 collaboration), (2) leveraging integral experiments optimized via artificial intelligence and machine learning algorithms to tease out compensating errors, and (3) the consideration in the nuclear data evaluation process of information coming from microscopic theoretical calculations. For theoretical physics, the use of scaling up between ab initio calculations in more phenomenological models, the definition of an effective interaction and its use in the calculation of to calculate fundamental physical observables (mean field and beyond) and the link with nuclear reaction theories and models will give rise to a considerable number of developments in the not so distant future **[Hila18]**.

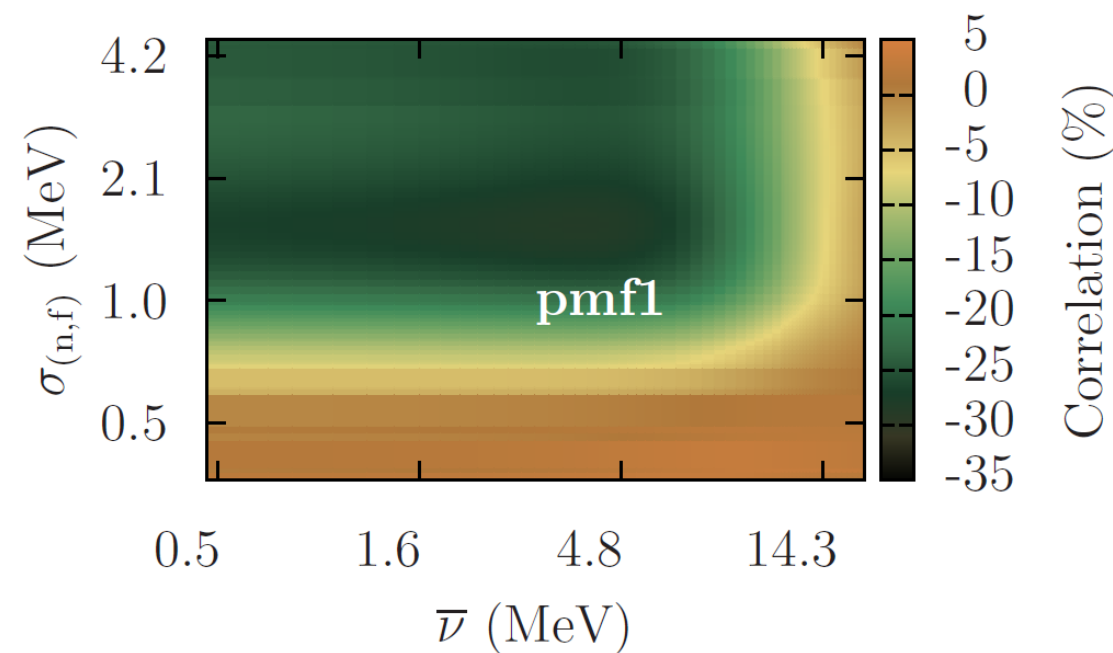


Figure 1

Correlation between the fission cross section and the nubar of ^{239}Pu as a function of the incident neutron energy obtained by assimilation of the JEZEBEL benchmark integral data.

Corrélation entre la section efficace de fission et le nubar du ^{239}Pu en fonction de l'énergie incidente du neutron obtenue après une assimilation de la donnée intégrale du benchmark JEZEBEL **[Roch17]**.

L'estimation des biais et incertitudes en physique nucléaire est une activité en plein essor. Notamment, pour l'évaluation des données nucléaires, diverses méthodes ont été mises en œuvre dans le cadre de la collaboration DAM/NNSA afin de proposer des données avec incertitudes. Cette montée en puissance s'accompagne de nouveaux problèmes à résoudre et de voies de progrès à mettre en œuvre. On peut les classer comme suit: problèmes liés à la taille des données à utiliser et/ou aux temps de calculs associés, estimation des incertitudes et biais provenant des calculs microscopiques, propagation de ces derniers vers les niveaux d'échelles plus applicatifs et enfin définition des domaines d'utilisation des approximations, biais et incertitudes évaluées. Pour ce dernier point, l'utilisation des expériences intégrales reste un enjeu important de par la forte réduction des incertitudes qu'elles induisent **[Baug18, Roch17, Roch21]**.

Pour l'évaluation des données nucléaires, les principales avancées ont porté tout d'abord sur l'utilisation de méthodes mathématiques robustes de type inférence bayésienne pour estimer les incertitudes dans le cadre de l'évaluation des redements de fission, des multiplicités et spectres de neutrons

prompts ainsi que les sections efficaces **[Regn21, Love21, Okum22, Neud19, Neud22]**. Des applications importantes sur le ^{239}Pu ont été proposées et se poursuivront dans le futur.

Cette synthèse de la connaissance théorique et expérimentale et son utilisation applicative nécessite de réduire les incertitudes et de lever des compensations d'erreurs. Cela génère trois démarches complémentaires: (1) concevoir, analyser des mesures de plus en plus précises et discriminantes (comme celles initiées dans la collaboration DAM/NNSA P104), (2) tirer parti d'expériences intégrales optimisées via l'intelligence artificielle et des algorithmes d'apprentissage automatique pour démêler les erreurs de compensation, et (3) prendre en compte dans l'évaluation des données nucléaires des informations provenant de calculs théoriques microscopiques. Pour la physique théorique, la remontée d'échelle entre les calculs ab-initio, la définition d'une interaction effective et son utilisation pour calculer des observables physiques fondamentaux (champs moyen et au-delà) et le lien avec les réactions nucléaires va susciter un nombre considérable de développements dans le futur **[Hila18]**.

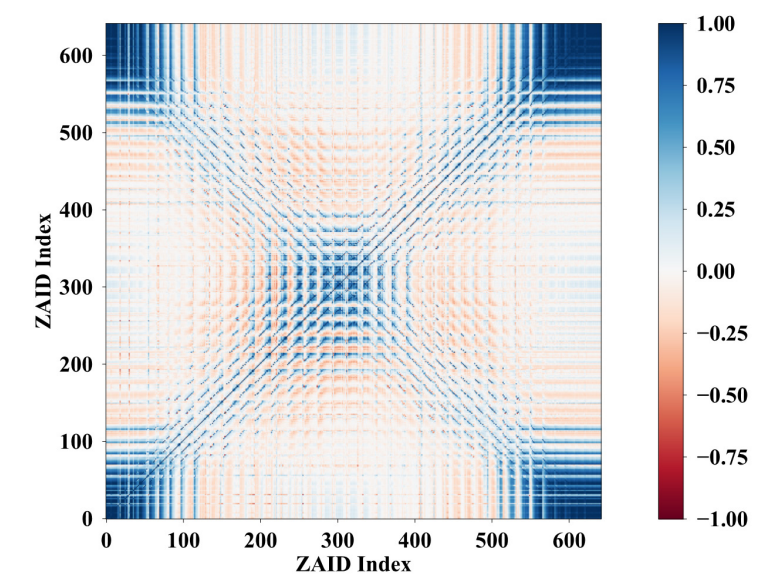


Figure 2

Matrice de corrélation des rendements de fission du ^{252}Cf .

Cf252 correlation matrix of fission product yields **[Okum22]**.

CEA-DAM: Le Ripault, Île-de-France, Gramat

Los Alamos National Laboratory

E. Bouton, A. Sollier, Ph. Hébert, A. LeFrancois

D. Dattelbaum, S. Sheffield, R. Gustavsen

E. Bouton, A. Sollier, Ph. Hébert, A. LeFrancois

D. Dattelbaum, S. Sheffield, R. Gustavsen

CEA-DAM: Le Ripault, Île-de-France, Gramat

Los Alamos National Laboratory

The conversion of reactants to products in high explosives occurs over the Chemical Reaction Zone (CRZ) from the von Neumann spike at the leading edge of a detonation wave to the Chapman-Jouguet sonic locus. This description is referred to as the Zel'dovich-von Neumann-Doering model. Reaction zones are important for simulating detonation propagation, particularly in confinement, under failure conditions, and in corner-turning geometries. Short reaction zones correlate with faster chemical reaction rates, smaller critical diameters and planar propagating detonation fronts.

Reaction zones for common explosives can vary greatly, for example from 100 μm for HMX to 25,000 μm for ammonium nitrate-fuel oil, and are typically measured using velocimetry at a windowed-interface following some propagation distance, x [Bou09, Bou12a, Bou12b, Bou12c, Dat16]. As part of this collaboration, we compared reaction zone measurements for explosive formulations containing 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene (TATB), and 2,4,6-trinitrotoluene (TNT). TATB-based formulations are known to have longer CRZs, which determine their propagation and failure behaviors. An early part of the collaboration compared the temporal resolution and data quality from two different velocimetry methods: velocity interferometer for any reflector (VISAR) and photonic Doppler velocimetry (PDV or HetV). We found that both methods gave comparable temporal resolution and particle velocity wave profiles, with PDV being somewhat noisier, and with poorer data return at PMMA (polymethyl methacrylate) windows due to the pressures associated with the detonation wave.

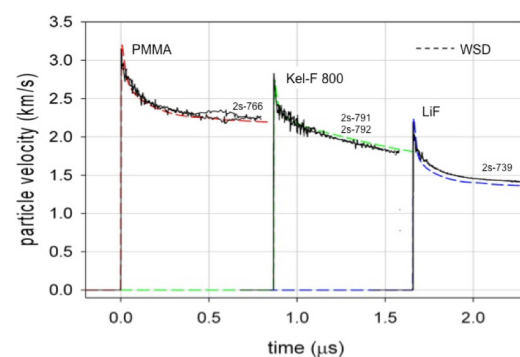


Figure 1
Particle velocity wave profiles for the TATB-based explosive PBX 9502 at three different windows measured using photonic Doppler velocimetry. The reaction zone has fast and slow components with $\tau \sim 0.022 \pm 0.005 \mu\text{s}$ and $0.28 \pm 0.01 \mu\text{s}$. Note that the profile at the Kel-F 800 window is least perturbed by the window.

Profils d'onde de vitesse des particules pour le PBX 9502 explosif basé sur TATB à trois fenêtres différentes mesurés à l'aide de la vélocimétrie Doppler photonique. La zone de réaction a des composantes rapides et lentes avec $\tau \sim 0,022 \pm 0,005 \mu\text{s}$ et $0,28 \pm 0,01 \mu\text{s}$. Notez que le profil à la fenêtre Kel-F 800 est le moins perturbé par la fenêtre.

One way to improve CRZ measurements is to make a high time resolution, *in situ* measurement. A near-equivalent approach is to use a window that is an impedance match to the explosive. Kel-F 800 polymer (polychlorotrifluoroethylene-co-vinylidene fluoride) is a near-perfect impedance match to TATB-based formulations such as PBX 9502 (95% TATB, 5% Kel-F 800). To test this approach, we developed optically transparent Kel-F 800 windows, and measured the index of refraction as a function of shock input pressure through a series of symmetric plate impact experiments [Gib20]. The window correction for Kel-F 800 was found to be $a(\lambda) = 1.014 \pm 0.003$. Measurements of the CRZ for PBX 9502 were then made at each of three windows: LiF, PMMA, and Kel-F 800. The particle velocity wave profiles measured by PDV/HetV are shown in Figure 1. As observed in the figure, the reaction zone has two components at the impedance-matched Kel-F 800 window, as well as at LiF, where the PBX 9502 products are at a second-shock condition. The profile at PMMA shows an increase in the reaction zone due to release at the interface, and as observed previously, the data return is poorer, which is believed to be due to decomposition of the PMMA window at these conditions. The reaction zone has fast and slow components with $\tau \sim 0.022 \pm 0.005 \text{ ms}$ and $0.28 \pm 0.01 \text{ ms}$. The particle velocity measured at the spike is $u_{vN} = 2.83 \pm 0.08 \text{ km/s}$ with $u_{vN} = 2.86 \text{ km/s}$ (predicted), and $u_{CJ} = 2.04 \text{ km/s}$ (predicted) for the Kel-F 800 window [Dat16a]. The profile at the Kel-F 800 window is least perturbed by the window. Similar measurements were made on a 97% TATB formulation, T2, in a rate stick configuration at CEA with both LiF and PMMA windows, and VISAR and HetV/PDV. The ZND profile is well resolved in both cases with the features of the fast and slow components better resolved at LiF [Sol22].

A second approach was also taken to better resolve the von Neumann spike. In this approach, the explosive products were expanded at a free surface into air or vacuum. By measuring the velocity waveform at the free surface in different atmospheres, the spike can be estimated by the free surface approximation. Optical shadowgraphy was also used in the experiments to record the product expansion from the free surface (Figure 2). Using the two approaches, the vN spike is bounded in a narrow range [Sol16]. For T2, this approach was used to bound the vN spike at $u_{vN} = 2.760 \text{ km/s}$ with $P_{vN} \sim 38.7 \text{ GPa}$. This is in good agreement with the predicted value of 37.5 GPa for PBX 9502.

The collaboration has allowed for comparison of measurements and models of the chemical reaction zones of explosives using different approaches with excellent agreement. The team has also performed joint experiments on measuring detonation front curvature *in situ*, and examined shock de-sensitization of TATB-based explosives, a challenging test for reactive burn models.

La transformation de l'explosif non réagi en produits a lieu dans la zone de réaction (ZR), qui s'étend du front de choc de la détonation caractérisé par le pic de von-Neumann à la surface sonique de Chapman-Jouguet. Cette description correspond au modèle de Zel'dovich-von Neumann-Doering. Décrire les zones de réaction est important pour simuler la propagation de la détonation, notamment dans un confinement, au voisinage des conditions d'extinction et dans des géométries de contournement. Les zones de réaction minces correspondent à des taux de réaction chimique plus rapides, à des diamètres critiques plus petits et à la propagation de fronts de détonation quasi-plans.

La zone de réaction d'explosifs courants peut varier fortement de 100 μm pour du HMX à 25 000 μm pour un mélange de nitrate d'ammonium et d'huile combustible, et est classiquement mesurée par vélocimétrie à travers une fenêtre après une certaine distance de propagation, x [Bou09, Bou12a, Bou12b, Bou12c, Dat16]. Dans le cadre de cette collaboration, nous avons comparé les mesures de zones de réaction pour des formulations explosives contenant du 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzène (TATB), et du 2,4,6-trinitrotoluène (TNT). Les compositions à base de TATB sont connues pour avoir des ZR plus longues, qui influencent fortement leurs régimes de propagation et d'extinction. Un premier volet de la collaboration a consisté à comparer la résolution temporelle et la qualité des données issues de deux méthodes différentes de mesure de vélocimétrie: l'interférométrie de vitesse pour tout réflecteur (VISAR) et la vélocimétrie hétérodyne (VH). Nous avons constaté que les deux méthodes donnaient des résolutions temporelles et des profils de vitesses matérielles comparables, quoiqu'un peu plus bruités avec la VH et avec des données un peu moins bonnes dans le cas des fenêtres en PMMA (polyméthacrylate de méthyle) en raison des pressions atteintes dans l'onde de détonation.

Une façon d'améliorer les mesures de ZR est d'effectuer une mesure *in situ* à haute résolution temporelle. Une approche quasi-équivalente est d'utiliser une fenêtre dont l'impédance est proche de celle de l'explosif. Le polymère Kel-F 800 (polychlorotrifluoroéthylène-co-fluorure de vinylidène) a une impédance de choc presque identique à celle de compositions à base de TATB comme le PBX 9502 (95% TATB, 5% Kel-F 800). Pour évaluer cette approche, nous avons développé des fenêtres en Kel-F 800 optiquement transparentes, et mesuré l'indice de réfraction en fonction de la pression d'entrée du choc en réalisant une série d'expériences d'impact de plaques symétriques [Gib20]. La correction pour la fenêtre en Kel-F 800 a été évaluée à $a(\gamma) = 1,014 \pm 0,003$. Les mesures de ZR pour le PBX-9502 ont été réalisées pour chacune des trois fenêtres en LiF, PMMA, et Kel-F 800. Les profils de vitesse matérielle mesurés par VH sont présentés sur la Figure 1. Comme on peut le voir, la zone de réaction a deux composantes avec une fenêtre à impédance adaptée en Kel-F 800, de même qu'avec du LiF (notons que dans

ce cas, les produits du PBX 9502 sont dans un état de rechoc). Avec du PMMA, le profil montre une augmentation de la zone de réaction à cause des détentes à l'interface. Comme indiqué précédemment, les données sont cependant de moins bonne qualité probablement à cause de la décomposition de la fenêtre en PMMA lors de la réflexion de l'onde de détonation. La zone de réaction a une composante rapide et une autre lente avec les temps caractéristiques suivants : $\tau \sim 0,022 \pm 0,005 \text{ ms}$ et $0,28 \pm 0,01 \text{ ms}$. La vitesse matérielle mesurée au pic est $u_{vN} = 2,83 \pm 0,08 \text{ km/s}$ et celle calculée $u_{vN} = 2,86 \text{ km/s}$ avec $u_{CJ} = 2,04 \text{ km/s}$ (prédit) dans le cas d'une fenêtre en Kel-F 800 [Dat16a]. Le profil de vitesse est aussi moins perturbé par la fenêtre en Kel-F 800. Des mesures similaires ont été faites au CEA par VISAR ou VH en bout de cartouches cylindriques en T2, une composition à 97% de TATB, à travers des fenêtres en PMMA ou en LiF. Le profil ZND est bien résolu, dans les deux cas, et la résolution des composantes lentes et rapides est meilleure avec une fenêtre en LiF [Sol22].

Une seconde approche a aussi été mise en œuvre pour déterminer plus précisément le pic de von Neumann. Celle-ci a consisté à observer l'expansion des produits de détonation de l'explosif dans de l'air ou du vide. En mesurant la vitesse de l'onde dans différentes atmosphères, le pic peut être estimé par l'approximation de la surface libre. Dans ces expériences, l'ombroscopie optique a été utilisée pour visualiser l'expansion des produits de détonation à partir de la surface libre (cf. Figure 2). En combinant ces deux approches, le pic de von Neumann peut être encadré dans une fourchette étroite [Sol16]. Pour T2, cela a conduit aux valeurs suivantes : $u_{vN} = 2,760 \text{ km/s}$ et $P_{vN} \sim 38,7 \text{ GPa}$. Ces valeurs sont en bon accord avec celle prédite de 37,5 GPa pour le PBX-9502.

Cette collaboration a également permis de comparer avec un excellent accord les mesures et les modèles de zones de réaction chimique des explosifs en utilisant différentes approches. L'équipe a également réalisé des expériences conjointes visant à mesurer la courbure du front de détonation *in situ*, et étudié la désensibilisation par choc d'explosifs à base de TATB qui est un phénomène difficile à simuler.

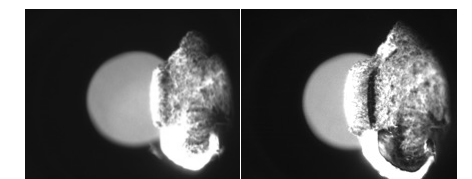


Figure 2
Ombroscopie de l'expansion des produits de détonation pour une composition explosive au TATB à $p = 1 \text{ atm}$. D'après l'approximation de surface libre, $P_{vN} \sim 27,9 \pm 1,6 \text{ GPa}$.

Shadowscopy of the expansion of detonation products for an explosive composition at TATB at $p = 1 \text{ atm}$. From the free surface approximation, $P_{vN} \sim 27.9 \pm 1.6 \text{ GPa}$.

RADIATIVE NEUTRON CAPTURE CROSS SECTIONS ON THE LU ISOTOPES: ^{176,175,174,173}Lu

CEA-DAM Île de France

Los Alamos National Laboratory

Radiative neutron capture is a well-known nuclear reaction studied for many stable nuclei. The prediction of the radiative capture cross section strongly depends on a set of well-known nuclear data. Usually, the averaged gamma width in the resonance region or/and cross-section data in the keV region are needed to tune the calculations. An additional difficulty in predicting neutron-capture cross section for unstable nuclei is the limited set of measured data. This research project was focused on the isotopic chain of Lutetium isotopes in order to build a cross-section systematics including stable and unstable isotopes. Six experiments were carried out between 2007 and 2014 at LANSCE using the DANCE detector to measure the radiative capture cross sections on the stable isotopes ¹⁷⁵Lu, ¹⁷⁶Lu and on the unstable isotopes ¹⁷³Lu and ¹⁷⁴Lu.

Except the ¹⁷⁵Lu target, all others targets, ¹⁷⁶Lu, and ^{173,174}Lu, were unique. Their fabrication has employed several facilities. The ¹⁷⁶Lu was produced by the mass separator SIDONIE in Orsay. The ^{173,174}Lu targets were produced through proton irradiation of hafnium at the IPF facility at LANL following by chemical separation at the hot-cells facility at LANL and electroplated deposition on titanium foils [Tay09, Tay13]. All targets were studied using the DANCE apparatus for several days exploiting neutron beams from the spallation target of the Lujan Center at LANSCE.

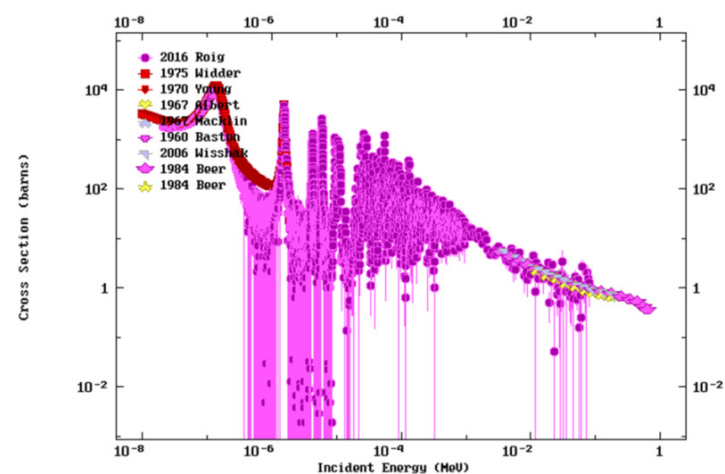


Figure 1
Radiative neutron-capture cross sections for the ¹⁷⁶Lu(n,γ) reaction extracted from the NNDC/EXFOR data base. Pink points depict this work using the DANCE detector.

Sections efficaces de capture neutronique radiative pour la réaction ¹⁷⁶Lu(n,γ) extraites des la base de données NNDC/EXFOR. Les points en rose représentent le travail cité ici.

O. Roig, A. Ebran, D. Denis-Petit, S. Hilaire, V. Méot, B. Morillon, S. Peru-Desenfans, P. Romain, C. Theroine, G. Rusev, E. M. Bond, T. A. Bredeweg, A. J. Couture, R. C. Haight, M. Jandel, T. Kawano, F. M. Nortier, J. M. O'Donnell, R. S. Rundberg, W. A. Taylor, J. L. Ullmann, D. J. Vieira

The capture cross section of the ¹⁷⁶Lu isotope was measured for a large energy range from thermal neutron energy to a few hundred keV with a very high accuracy [Roi14, Roi16]. More than 60 new resonances were identified from this reaction in the energy region from 10 to 200 eV and the neutron-capture cross section extended from 200 eV to 1 keV. The data were transmitted to be included into the EXFOR database. The neutron capture cross section from ¹⁷⁶Lu is shown in Figure 1. In addition, a study of the gamma-ray spectra measured for various multiplicities indicated that the photon strength function (PSF) used in the statistical model can be improved by adding the M1 scissors-mode resonance. Comparison of predictions using different PSF with measured two-step cascade spectrased references [Den16, Hil18]. This finding opens the possibility for using microscopic models like QRPA for calculating PSF [Bau13], because modern calculations reproduce well the main components of PSF like the E1 giant dipole, the M1 spin-flip and the M1 scissors-mode resonances. Our measurements of the radiative capture cross-sections for the ¹⁷⁵Lu(n,γ) [Ebr19, Nog19] the ¹⁷³Lu(n,γ) [Ebr19] reactions support this conclusion, shown in Figure 2. For example, the average gamma width for the latter reaction calculated with PFS from QRPA is 79 meV, which agrees well with the measured width of 73±15 meV.

These conclusions motivate research studies focused on determining more directly the gamma strength functions to systematically test the PSF based on QRPA formalism.

SECTIONS EFFICACES DE CAPTURE RADIATIVE DES NEUTRONS SUR LES ISOTOPES LU: ^{176,175,174,173}Lu

O. Roig, A. Ebran, D. Denis-Petit, S. Hilaire, V. Méot, B. Morillon, S. Peru-Desenfans, P. Romain, C. Theroine, G. Rusev, E. M. Bond, T. A. Bredeweg, A. J. Couture, R. C. Haight, M. Jandel, T. Kawano, F. M. Nortier, J. M. O'Donnell, R. S. Rundberg, W. A. Taylor, J. L. Ullmann, D. J. Vieira

La réaction de capture neutronique radiative est une réaction nucléaire bien connue sur des noyaux stables. Ce projet de recherche s'est orienté sur la chaîne isotopique du Lutétium afin de comparer des mesures de sections efficaces de capture radiative sur des isotopes stables et instables du Lutétium. En effet, la capacité à prédire ces sections efficaces est très dépendant des jeux de données nucléaires à disposition. Généralement, il est nécessaire de disposer, notamment de la largeur gamma moyenne dans la région des résonances ou des données de sections efficaces à l'énergie du keV, pour ajuster les calculs. Pour ces raisons, pour des noyaux instables où les données sont rares et souvent de faible qualité, prédire les sections efficaces de capture radiative pour un large domaine en énergie est une tâche difficile. De ce fait, de 2007 à 2014, six expériences ont été entreprises au LANSCE à Los Alamos pour mesurer successivement les sections efficaces de capture radiative sur les isotopes ¹⁷⁵Lu, ¹⁷⁶Lu et ^{173,174}Lu.

Excepté la cible de ¹⁷⁵Lu, toutes les cibles de Lutétium (¹⁷⁶Lu, et ^{173,174}Lu) sont uniques. Leur fabrication a nécessité l'intervention de plusieurs installations. Celle de ¹⁷⁶Lu a été produite par le séparateur isotopique de masse SIDONIE situé à Orsay. Les cibles ^{173,174}Lu ont été fabriquées après une irradiation d'un échantillon d'Hafnium par un faisceau de proton délivré par le LANSCE sur l'installation IPF [Tay12, Tay13]. Elle a été suivie d'un refroidissement et ensuite d'une séparation chimique Yb/Hf/Lu à chaud effectuée par le laboratoire CNR de LANL. Une électrodeposition a permis de transférer la solution de ^{173,174}Lu sur des feuilles de titane. Toutes les cibles ont été ensuite insérées successivement au centre de DANCE face au faisceau de neutrons venant de la cible de spallation du centre Lujan au LANSCE.

La section efficace de capture radiative sur le ¹⁷⁶Lu a été mesurée pour un large domaine en énergie neutron, de l'énergie thermique au keV avec une grande précision [Roi14, Roi16]. Plus d'une soixantaine de résonances ont pu être caractérisées dans la région de 10 à 200 eV et toute une partie, de 200 eV au keV, a pu être complétée. Les données ont été transmises aux bases de données NNDC/EXFOR (cf. Figure 1).

En complément de ces mesures, une étude des spectres gamma obtenus pour différentes coupures en multiplicité a montré que la fonction de force gamma (PSF) utilisée dans le modèle statistique pour calculer les sections efficaces de capture et la désexcitation gamma (cascade gamma) devait être enrichie via l'intégration d'une résonance M1 de mode « ciseau » afin de reproduire correctement les spectres mesurés [voir référence Den16, Hil18].

CEA-DAM Île de France

Los Alamos National Laboratory

Cette conclusion signifie que des calculs plus microscopiques comme ceux que nous obtenons avec le formalisme QRPA pourrait être avantageusement utilisés pour décrire la fonction de force gamma afin d'être moins dépendant des rares données nucléaires mesurées sur certains noyaux [Bau13]. Nous avons montré que ces conclusions étaient confirmées par la mesure de la capture radiative de la réaction ¹⁷⁵Lu(n,γ) prise comme référence [Ebr19, Nog19] et celle de la réaction ¹⁷³Lu(n,γ) comme nouveau résultat [Ebr19], montré sur la Figure 2. Seulement quelques résonances de cette dernière réaction ont été extraites montrant que les largeurs radiatives moyennes mesurées et calculées avec des PSF basées sur le formalisme QRPA étaient en excellent accord pour le noyau peu connu et instable ¹⁷⁴Lu, 73±15 meV and 79 meV respectivement.

Ces conclusions ont donné des perspectives très encourageantes pour des études plus précises de détermination plus directe des fonctions de force gamma afin de les comparer systématiquement aux calculs réalisés avec le formalisme QRPA. Des développements du formalisme ont été lancés pour être en mesure de calculer tous les noyaux. Des études de ce type sur des fragments de fission, noyaux instables exotiques, ont aussi été réalisées.

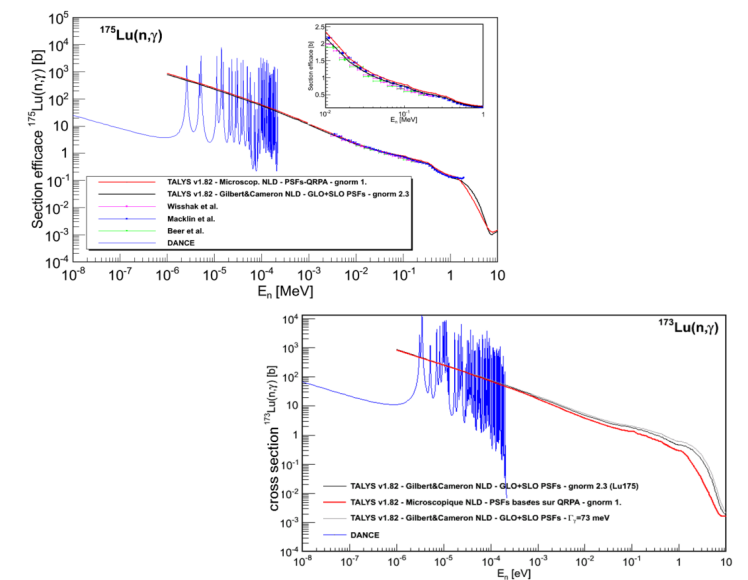


Figure 2
Sections efficaces de capture radiative pour les réactions ¹⁷⁵Lu(n,γ) et ¹⁷³Lu(n,γ) comparées aux calculs utilisant des PSF basées sur le formalisme QRPA.

Radiative capture cross-sections for the ¹⁷⁵Lu(n,γ) and the ¹⁷³Lu(n,γ) reactions compared to calculations using PSF based on QRPA formalism.

CEA-DAM Île de France S. Lemaire, M. Caillaud

Los Alamos National Laboratory G. H. Hughes, J. E. Sweezy

Over the past decades, both US (LANL) and French (CEA/DIF) laboratories have shown a strong interest in using radiographic capabilities for hydrodynamic experiments.

Three dimensional Monte-Carlo electron-photon transport codes are used to design and analyze these experiments (MCNP for LANL and DIANE for CEA/DAM).

Monte-Carlo codes are widely used for both CEA and US/DOE applications as they allow the simulation of electron/positron/photon cascade as close as possible to the actual experiments. They are often seen as providing an 'exact' or reference solution as they mimic the actual path of particle through matter. These codes rely on cross-section data, probabilistic collision sampling, and 3-D geometry.

The purpose of the DAM/NNSA collaboration is to test, validate, and improve MCNP and DIANE codes through :

- inter-code comparisons based on benchmark geometries which are intentionally very simple and whose specifications are relevant to our problems
- comparisons of simulations with published experiments

The analysis of the results obtained with the two codes resulted in identifying differences, that were explained and led to either more confidence in the algorithms or improvement of our codes.

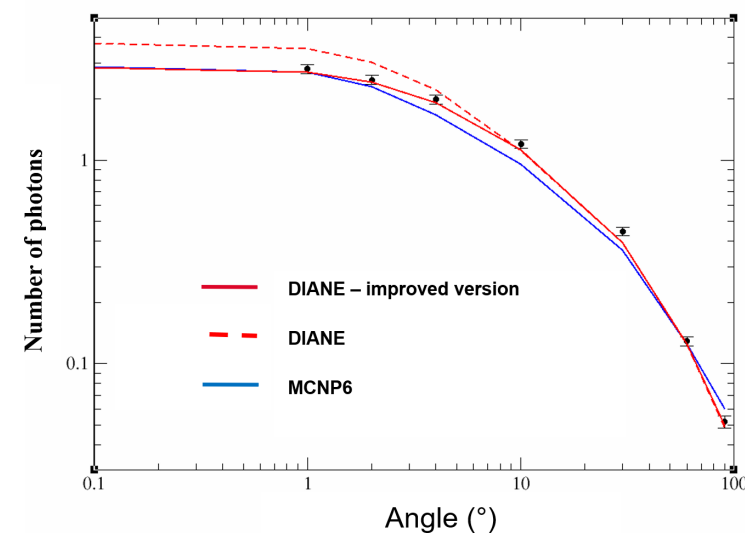


Figure 1
Angular distribution of photons emitted from the interaction of 15 MeV electrons on lead target. Comparison of DIANE and MCNP6 simulations to experimental results [Fad91].

Distribution angulaire des photons issus de l'interaction d'électrons de 15 MeV sur une cible de Plomb. Comparaison entre les simulations DIANE et MCNP6 et les résultats expérimentaux [Fad91].

Two experiments were used in the framework of the DAM/NNSA collaboration (Figure 1).

Comparisons of experimental data with MCNP and DIANE simulations led to an improved version of the DIANE code. In particular, a more accurate model of electron angular deflection was implemented in DIANE. This led to a better description of the forward angle gamma emissions. The agreement with experimental data is now excellent with DIANE for all targets (Aluminium, Beryllium and Lead). MCNP results are also very good and showed the promising capabilities of the 'single event' algorithm for electron transport (Figure 2).

Comparisons with experimental data led the DIANE team to release an improved version of the code that would take into account knock on electrons in the electron transport algorithm. With this modification, the DIANE electron transmission coefficients that are higher than 1.0 are now in excellent agreement with experimental data. MCNP simulations also showed very good agreement with experimental data for all targets, electron energies and thicknesses.

This work illustrates the importance of using cross code comparisons between independent codes as a mean to consolidate our V&V tools. It confirms the excellence of both LANL and CEA/DIF neutron and photon transport codes in the physics community as well as its teams and developers.

S. Lemaire, M. Caillaud CEA-DAM Île de France

G. H. Hughes, J. E. Sweezy Los Alamos National Laboratory

La radiographie X éclair est utilisée au CEA/DAM et au LANL dans le cadre d'expériences hydrodynamiques pour observer des objets à forte variation de densités sur de courts temps d'observation.

Des codes de calcul Monte-Carlo 3D (MCNP pour le LANL et DIANE pour le CEA/DAM) sont utilisés pour concevoir et analyser ces expériences.

Les codes Monte Carlo permettent de simuler le transport des neutrons, photons, électrons et positrons pour les applications du CEA comme du DOE américain. Ils sont réputés 'exacts' ou 'de référence' par leur capacité à reproduire le parcours des particules dans la matière. Ils utilisent des modèles probabilistes de chocs ainsi que des bibliothèques de sections efficaces d'interaction dans des géométries à trois dimensions.

L'objectif de la collaboration DAM/NNSA est de tester, de valider et d'améliorer les codes de calcul de deux façons :

- par des expériences numériques en réalisant des comparaisons code à code sur des benchmarks pertinents
- par la comparaison de simulations avec des expériences de laboratoire publiées

L'analyse comparative des résultats des codes a permis d'identifier des différences, de les expliquer et de faire évoluer chacun des codes pour prendre en compte ce retour d'expérience.

Nous illustrons ci-après deux expériences utilisées dans le cadre de la collaboration (Figure 1) :

La comparaison aux données expérimentales a permis d'améliorer le modèle de déflexion angulaire des électrons dans DIANE en particulier aux angles avant. La nouvelle version de DIANE permet en effet de restituer très précisément cette expérience y compris pour l'Aluminium et le Béryllium.

Les résultats MCNP ont également montré d'excellents résultats obtenus avec la méthode de transport des électrons dite « single event » (Figure 2).

La comparaison aux données expérimentales a conduit l'équipe de développement du code DIANE à introduire la production d'électrons knock-on dans l'algorithme de transport. Cette amélioration a permis de restituer les niveaux de transmission des faisceaux d'électrons supérieurs à un, tout en conservant un excellent accord sur toute la plage en transmission. Les simulations MCNP ont également montré un très bon accord avec les données expérimentales.

Ce travail illustre l'utilité du benchmarking entre codes de référence, d'un cadre de collaboration allant au-delà du constat des écarts, et plus généralement l'importance de disposer de codes indépendants pour consolider la V&V de ces outils. Il confirme également le positionnement des codes de neutronique du CEA et du LANL au mieux de l'état de l'art mondial, et l'inscription de leurs développeurs au sein de la communauté scientifique de référence.

DIANE est le code de référence 3D Monte Carlo du CEA/DAM-Ile de France. Il permet de traiter des problèmes de neutronique, photonique et de particules chargées. L'architecture du code est massivement parallèle.

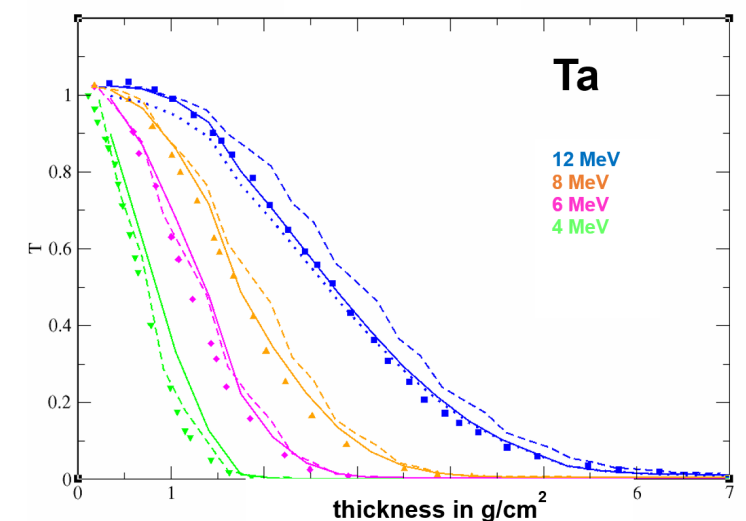


Figure 2
Comparaison des calculs aux mesures de transmission d'un faisceau d'électrons de différentes énergies 4, 6, 8 et 12 MeV sur une cible de Tantale en fonction de son épaisseur (traits pleins/pointillés avec/sans électrons knock-on pour DIANE, traits tirés pour MCNP6, points pour les résultats expérimentaux) [Eber69].

Transmission of 4.0- to 12.0-MeV electrons through Ta target as a function of the thickness (full/dotted with/without knock-on electrons for DIANE code, dash line for MCNP6, dots for experimental results) [Eber69].

CEA-DAM Île de France
Sandia National Laboratory

Lawrence Livermore National Laboratory
Los Alamos National Laboratory
University of Nevada – Reno
Prism Computational Sciences

Ch. Blancard, Ph. Cossé, G. Faussurier, F. Gilleron, J.-Ch. Pain
J. E. Bailey, T. Nagayama, G. P. Loisel, G.A. Rochau,
S. B. Hansen, G.S. Dunham, R. More, T. A. Gomez
C. A. Iglesias, D. A. Liedahl, B. Wilson
J. Colgan, C. Fontes, D. Kilcrease, M. Sherrill
R. C. Mancini
J. J. MacFarlane, I. E. Golovkin

The solar abundance problem emerged twenty years ago, and it remains an enigma today. It motivates opacity measurements at Solar interior conditions, since the disagreement between Solar models and helioseismic observations could be resolved if the true Solar matter opacity is higher than models predict. This hypothesis was not supported by the first fruits of our DAM-NNSA collaboration published in the 2007-2012 period. Iron opacity spectra measured on the Sandia Z machine at the highest temperatures ever obtained in a terrestrial laboratory opacity experiment were well reproduced by modern opacity models. However, beginning about 10 years ago, improved Z opacity experiments reached even more extreme conditions. Opacity model predictions for iron failed to reproduce measurements taken above 2 MK temperatures. This is equivalent to the boundary between the Solar radiation and convection zones. This observation [Bai15] strongly stimulated the involved scientific communities, generating several hundred citations.

On the side of the experimenters, the reliability of the measurements was ensured (e.g. [Nag16, Nag17]). As for theorists, new absorption mechanisms have been proposed, but are still discussed (e.g. [Mor19, Kru21]). In 2019, new results showed that Nature is even more complicated than we previously knew. The opacity spectra of chromium (Z=24) and nickel (Z=28) obtained under the same conditions of those of iron (Z=26) reproduce some of the published iron model-data disagreements, but do not reproduce other aspects [Nag19] (Figure 1). Our studies were recently extended to oxygen. This element is another essential player in the radiative zone of the Sun and these new studies ensure a lively future for our collaboration. This will certainly open new perspectives, in particular thanks to the brand-new Sandia capability to acquire time-resolved spectra (Figure 2). These new data will quantify the effect of temporal gradients, expand the density and temperature conditions available for opacity measurements, and help enable cross-comparisons with measurements acquired on the NIF facility.

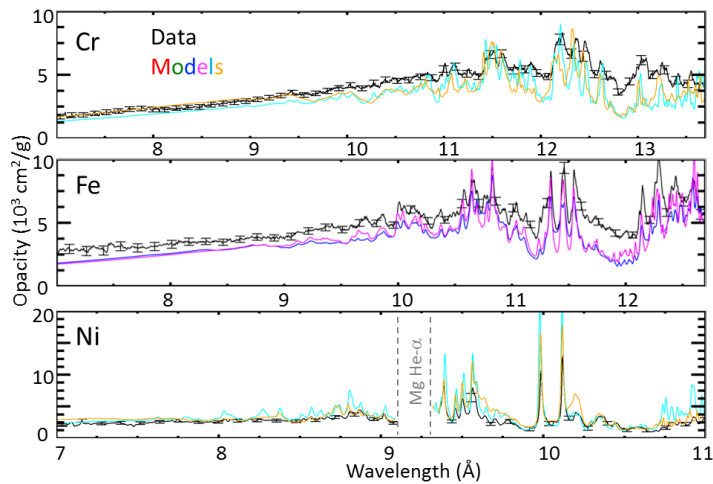


Figure 1
Opacities of Cr, Fe and Ni obtained on the Z machine (black) and calculated by different codes (colors), around 180 eV and $3 \times 10^{22} \text{ e}^-/\text{cm}^3$. For each element, both the number of bound electrons and the sensitivity to plasma perturbations differ. Thus, the systematic observations as a function of Z help unravel competing physics effects that influence the opacity.

Opacités de Cr, Fe et Ni obtenues sur la machine Z (noir) et calculées par différents codes (couleurs), autour de 180 eV et $3 \times 10^{22} \text{ e}^-/\text{cm}^3$. Pour chaque élément, à la fois le nombre d'électrons liés et la sensibilité aux perturbations du plasma diffèrent. Ainsi, les observations systématiques en fonction du numéro atomique aident à démêler les effets physiques concurrents qui influencent l'opacité.

Ch. Blancard, Ph. Cossé, G. Faussurier, F. Gilleron, J.-Ch. Pain
J. E. Bailey, T. Nagayama, G. P. Loisel, G. A. Rochau,
S. B. Hansen, G. S. Dunham, R. More, T. A. Gomez
C. A. Iglesias, D. A. Liedahl, B. Wilson
J. Colgan, C. Fontes, D. Kilcrease, M. Sherrill
R. C. Mancini
J. J. MacFarlane, I. E. Golovkin

La connaissance des abondances solaires demeure une énigme depuis une vingtaine d'années. Elle motive les mesures d'opacité dans les conditions typiques de l'intérieur du Soleil, car le désaccord entre les modèles et les observations héliosismiques pourrait être résolu si l'opacité de la matière solaire était supérieure aux prédictions théoriques. Cette hypothèse n'a pas été confirmée par les premiers résultats de notre collaboration DAM-NNSA publiés entre 2007 et 2012. Les spectres d'opacité du fer mesurés sur la machine Z de la Sandia, aux températures les plus élevées jamais obtenues dans une expérience d'opacité en laboratoire, ont été bien reproduits par les codes modernes. Cependant, depuis environ 10 ans, les expériences d'opacité sur la machine Z atteignent des conditions encore plus extrêmes, et les modèles théoriques pour le fer ne parviennent plus à reproduire les mesures effectuées au-delà d'une température de 2 MK. Ces conditions sont représentatives de la limite entre les zones radiative et convective du Soleil. Ce constat [Bai15] a fortement stimulé les communautés scientifiques impliquées, comme en témoigne le nombre de citations (plusieurs centaines en 7 ans). Les expérimentateurs ont assuré la reproductibilité des mesures, dont la fiabilité est incontestable (p.ex. [Nag16, Nag17]). Du côté des théoriciens, de nouveaux mécanismes d'absorption ont été proposés, mais sont encore

CEA-DAM Île de France
Sandia National Laboratory

Lawrence Livermore National Laboratory
Los Alamos National Laboratory
University of Nevada – Reno
Prism Computational Sciences

discutés (p.ex. [Mor20] et [Kru21]). En 2019, de nouveaux résultats ont montré que les choses étaient plus compliquées que ce que nous pensions. Les spectres d'opacité du chrome (Z=24) et du nickel (Z=28) obtenus dans les mêmes conditions que ceux du fer (Z=26) reproduisent certains des désaccords observés pour le fer, mais pas tous [Nag19] (Figure 1). Nos investigations ont été récemment étendues à l'oxygène. Cet élément est un autre acteur essentiel de la zone radiative du Soleil, et ces nouvelles études promettent un bel avenir à notre collaboration. Elles ouvriront certainement de nouvelles perspectives, notamment grâce à la toute nouvelle capacité de la Sandia à acquérir des spectres résolus en temps (Figure 2). Ces nouvelles données devraient permettre de quantifier l'effet des gradients temporels, d'étendre les gammes de densité et de température accessibles aux mesures d'opacité et d'effectuer des comparaisons croisées avec les mesures réalisées sur le NIF.

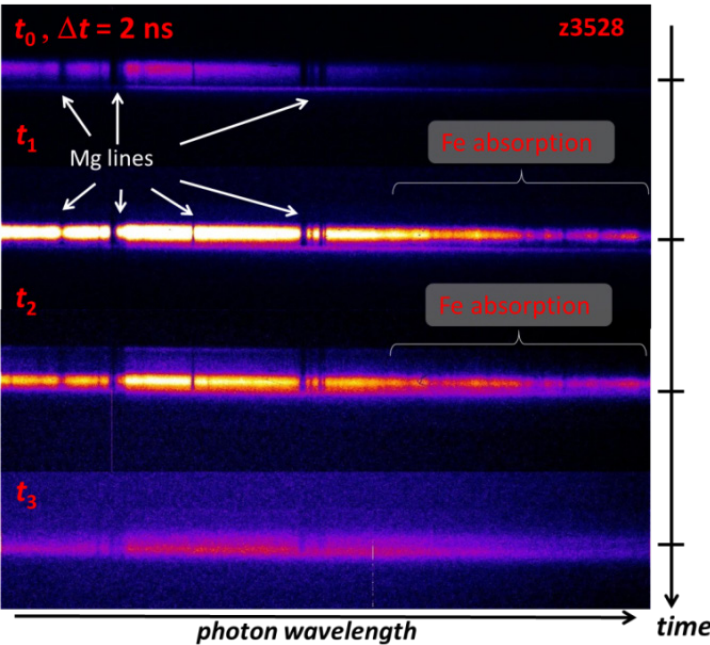


Figure 2
Spectres d'absorption Mg+Fe résolus en temps obtenus sur la machine Z utilisant le nouveau détecteur d'imagerie X ultra-rapide. Les évolutions de la température et de la densité sont déduites des raies de Mg et l'absorption de Fe peut fournir l'opacité résolue en temps.

Time-resolved Mg+Fe absorption spectra obtained the Z machine using the novel ultra-fast x-ray imaging detector. The temperature and density evolution is measured from the Mg lines and the Fe absorption can provide time resolved opacity.

The goal of this proposal was to investigate and validate the surrogate reaction technique for (n,γ) reactions in deformed nuclei. In this method, the compound nucleus is produced via an alternate (surrogate) direct reaction and its decay (by fission, gamma or neutron emission) is measured in coincidence with the outgoing appropriate charged particle. The surrogate method consists in using the measured decay probabilities in a neutron capture calculation.

$$\sigma_{n\chi}(E_{neut}) = \sigma_{CN}(E_{neut}) \times P_{\chi}^{CN}(E_{exc}),$$

where E_{neut} is the incident neutron energy, E_{exc} the excitation energy of the compound nucleus and $P_{\chi}^{CN}(E_{exc})$ the decay probability of compound nucleus in χ channel.

An important issue that needed to be investigated in the context of surrogate reactions is the difference between the distributions of the J^{π} states populated in the compound nucleus produced in the (n,γ) and surrogate reactions. We used the known case of $^{175}\text{Lu}(n,\gamma)$ as our benchmark and compared the cross sections obtained by different surrogate reactions entrance and exit channels to it.

The first experiment performed by the collaboration was done at the Orsay Tandem using the transfer reactions ($^3\text{He},p$) and

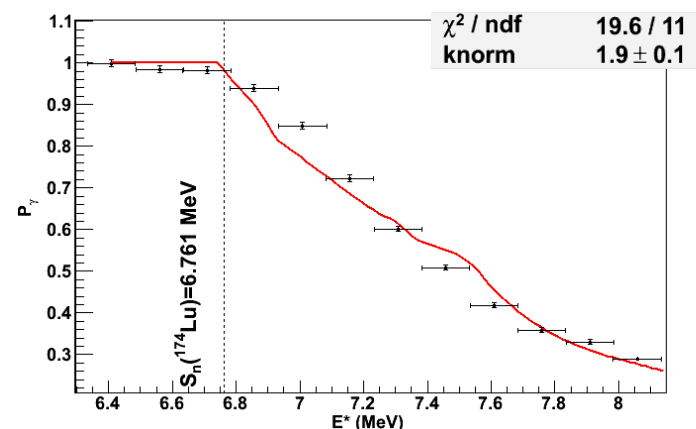


Figure 1
Gamma decay probability in the $^{175}\text{Lu}(p,d)^{174}\text{Lu}$ reaction. In red, the result of the adjustment.

La figure 1 montre la probabilité de décroissance gamma dans la réaction $^{175}\text{Lu}(p,d)^{174}\text{Lu}$ ainsi que le résultat de l'ajustement. Le facteur de normalisation est de 1.9, donnant une valeur de la largeur radiative moyenne pour les résonances s autour de S_n de 73 ± 4 meV. Cette valeur peut être comparée à la valeur de 74 ± 2 meV mesurée dans la réaction $^{173}\text{Lu}(n,\gamma)$.

O. Roig, V. Meot, A. Ebran, A. Blanc, C. Theroine, P. Chau, P. Romain
J. T. Harke, J. Escher, R.O. Hughes, N. Scielzo, I. Thompson
M. Jandel, T. Bredeweg, E. Bond, R. Rundberg, D. Viera, J. Wilhelmy, F. Nortier, W. Taylor, J. Ullmann, A. Couture, J. O'Donnell, R. Haight, J. Wouters

($^3\text{He},\alpha$) [Bou12]. Results showed a disagreement between our surrogate results and the neutron-induced reaction data. The spin distributions extracted in the experiment are very different from those produced in a radiative neutron capture reaction. In this work, we have shown it is impossible to only use the gamma emission probabilities in the calculation of the radiative neutron capture cross section to obtain the correct cross section.

A second experiment was performed using the STAR/LiBerACE setup at TAMU University Cyclotron Institute [Del15]. The gamma decay probabilities were extracted from the $^{175}\text{Lu}(p,d)$ reaction to adjust the neutron capture cross section of the $^{173}\text{Lu}(n,\gamma)$ reaction. In the Hauser-Feshbach formalism, the gamma emission probability is written as:

$$P_{\gamma}(E_{exc}) = \sum_{J^{\pi}} S(E_{exc}, J^{\pi}) \times G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi}),$$

with $S(E_{exc}, J^{\pi})$ the spin distribution of the compound nucleus, $G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi})$ the gamma branching ratio:

$$G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi}) = \frac{k_{\text{norm}} \times T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})}{T_n(E_{exc}, J^{\pi}) + k_{\text{norm}} \times T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})},$$

and where $T_n(E_{exc}, J^{\pi})$ and $T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})$ are the neutron and gamma transmission coefficients, respectively.

k_{norm} is a coefficient adjusted to normalize the gamma-ray transmission coefficients on the radiative capture width of neutron resonances.

In the present method, k_{norm} is adjusted using the $P_{\gamma}(E_{exc})$ measured in the surrogate reaction, with both transmission coefficients calculated using the TALYS1.4 code.

For the (p,d) reaction, the spin distribution, $S(E_{exc}, J^{\pi})$, is obtained using the $^{174}\text{Yb}(p,d)^{173}\text{Yb}$ measured in the same conditions.

Le but de cette fiche était d'étudier et de valider la technique de réaction de substitution pour les réactions (n,γ) dans les noyaux déformés. Dans cette méthode, le noyau composé est produit via une réaction directe alternative (de substitution) et sa désintégration (par fission, gamma ou émission de neutrons) est mesurée en coïncidence avec la particule chargée appropriée sortante. La méthode de substitution consiste alors à utiliser les probabilités de décroissance mesurées dans un calcul de capture de neutrons,

$$\sigma_{n\chi}(E_{neut}) = \sigma_{CN}(E_{neut}) \times P_{\chi}^{CN}(E_{exc}),$$

où E_{neut} est l'énergie du neutron incident, E_{exc} l'énergie d'excitation du noyau composé et $P_{\chi}^{CN}(E_{exc})$ la probabilité de désintégration du noyau composé dans la voie χ . La différence entre les distributions des états peuplés dans les réactions (n,γ) et les réactions de substitution est un problème important qui peut invalider la méthode. Dans ce contexte, nous avons utilisé la réaction bien connue $^{175}\text{Lu}(n,\gamma)$ afin de comparer les sections efficaces obtenues par différentes réactions de substitution.

La première expérience réalisée par la collaboration a été faite au Tandem d'Orsay en utilisant les réactions de transfert ($^3\text{He},p$) et ($3\text{He},\alpha$) [Bou12]. Les résultats montrent un désaccord entre les sections efficaces obtenues par la méthode de substitution et celles induites par les neutrons. Les distributions de spin extraites dans l'expérience sont très différentes de celles produites dans une réaction de capture radiative de neutrons. Dans ce travail, nous avons montré l'impossibilité d'utiliser directement les probabilités d'émission gamma dans le calcul de la section efficace radiative de capture des neutrons.

Une deuxième expérience a été réalisée en utilisant la configuration STAR/LiBerACE au cyclotron de l'Université TAMU [Del15]. La probabilité de d'émission γ a été extraite dans la réaction $^{175}\text{Lu}(p,d)$ pour ajuster la section efficace de $^{173}\text{Lu}(n,\gamma)$. Dans le formalisme Hauser-Feshbach, la probabilité d'émission gamma s'écrit :

$$P_{\gamma}(E_{exc}) = \sum_{J^{\pi}} S(E_{exc}, J^{\pi}) \times G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi}),$$

avec $S(E_{exc}, J^{\pi})$ la distribution de spin du noyau composé, $G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi})$ le rapport d'embranchement γ :

$$G_{\gamma}^{CN}(E_{exc}, J^{\pi}) = \frac{k_{\text{norm}} \times T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})}{T_n(E_{exc}, J^{\pi}) + k_{\text{norm}} \times T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})},$$

$T_n(E_{exc}, J^{\pi})$ et $T_{\gamma}(E_{exc}, J^{\pi})$ les coefficients de transmission neutron et γ , respectivement.

k_{norm} est un coefficient qui permet de normaliser le coefficient de transmission γ sur les largeurs radiatives des résonances neutroniques.

Dans la méthode présentée ici, k_{norm} est ajusté sur les $P_{\gamma}(E_{exc})$ mesurées dans la réaction de substitution, les deux coefficients de transmission étant calculés à l'aide du code TALYS1.4.

Pour la réaction (p,d), la distribution de spin $S(E_{exc}, J^{\pi})$ est obtenue en utilisant la réaction $^{174}\text{Yb}(p,d)^{173}\text{Yb}$ mesurée dans les mêmes conditions.

Le très bon accord entre les grandeurs obtenues par la réaction de transfert et celle mesurée par capture neutronique illustre l'apport de la méthode de substitution aux évaluations.

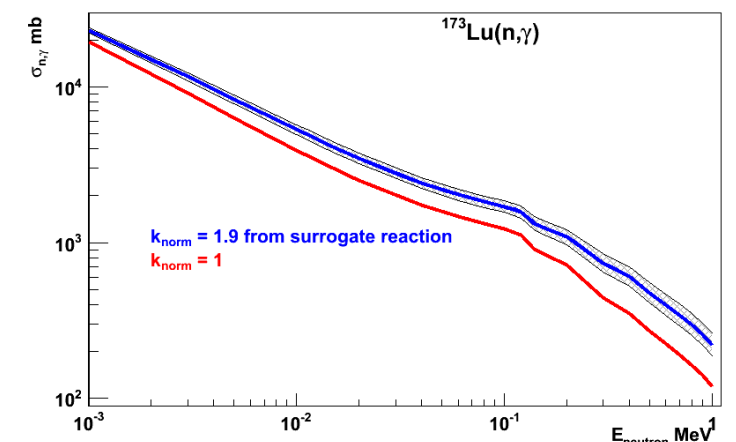


Figure 2
La figure 2 présente le calcul de la section efficace $^{173}\text{Lu}(n,\gamma)$ basé sur la valeur de $k_{\text{norm}} = 1$ (sans normalisation) et sur la valeur $k_{\text{norm}} = 1.9 \pm 0.4$. Les barres d'erreur sont propagées à la section efficace évaluée.

Calculation of the $^{173}\text{Lu}(n,\gamma)$ cross section without normalization ($k_{\text{norm}}=1$) et with k_{norm} obtained from the $^{175}\text{Lu}(p,d)$ reaction.

CEA-DAM Valduc

B. Oudot, C. Ciszak

B. Oudot, C. Ciszak

CEA-DAM Valduc

Lawrence Livermore National Laboratory

A. Perron, E. E. Moore, P. E. A. Turchi

A. Perron, E. E. Moore, P. E. A. Turchi

Lawrence Livermore National Laboratory

The prediction of phase transformation and phase diagram of multi-component complex alloys is undoubtedly the Holy Grail of materials science, and this is particularly true for nuclear materials. Based on the semi-phenomenological CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) methodology that has been very successful in assessing the thermodynamic properties of complex multi-component alloys for more than fifty years, with input from *ab initio* energetics when needed, the objective of this project is to develop a thermodynamic database with resulting phase diagrams for a series of Pu-Ga-based alloys, and provide guidance for experiments for the purpose of further validating the thermodynamic database.

Pu-(U)-Ga. Based on an extensive literature search on phase stability properties, and by recasting the bcc phase *ab initio* energetics in the CALPHAD framework, the Pu-U phase diagram has been successfully thermodynamically re-assessed in the entire range of alloy composition and temperature [Per14]. Then, the Pu-U thermodynamic functions have been combined with the Pu-Ga and U-Ga ones to predict the ternary Pu-U-Ga system. It is worth noting that the Pu-U-Ga system has never been reported in the scientific literature before the present study [Per14]. The CALPHAD predictions indicate that a small amount of U impacts the (δ -Pu) Pu-Ga phase stability by precipitating the complex η and ζ phases, and therefore may impact swelling and mechanical integrity on aging.

Pu-(U-Am-Al)-Ga. An *ab initio* informed thermodynamic assessment of the Pu-U-Am system has been performed by recasting the fcc and/or bcc phase *ab initio* energetics of the three binaries (Am-U, Pu-U and Am-Pu) in the CALPHAD framework [Per15]. A very poor miscibility between Am and U has been predicted with a high-temperature liquid miscibility gap. Regarding the phase stability of the ternary system, we confirmed that Am acts as a strong δ -stabilizer for the Pu-rich alloys whereas this effect is less pronounced for the U-rich alloys. In addition, the CALPHAD assessments of the Pu-Al system (two options), of the slightly characterized Am-Al phase diagram, and of the completely unknown Am-Ga system have been performed and permitted to develop a new self-consistent CALPHAD thermodynamic database involving Al, Am, Ga, Pu, and U [Per16]. Predictions have been made on the impact of the daughter products of Pu (U and Am) on Al- and Ga-stabilized Pu-based alloys. A phase stability study of ternary and quaternary systems highlighted the δ -stabilizing effect of Al, Ga, and Am, and the destabilizing effect of U (acting as a stabilizer for the complex η and ζ phases).

Pu-(U-Fe)-Ga. A new self-consistent CALPHAD thermodynamic database covering the interaction of actinide alloys such as the δ -stabilized Pu-Ga alloy with iron (impurity effects on phase stability) has been developed [Moo19]. The phase diagram and thermodynamic properties of plutonium-iron (Pu-Fe) and uranium-iron (U-Fe) systems have been successfully reassessed, with emphasis on the actinide rich side. Density functional theory (DFT) calculations validated the stability of the stoichiometric (Pu,U)₆Fe and (Pu,U)Fe₂ compounds by computing their formation enthalpies. The thermodynamic assessment of Fe-Ga was also performed for the first time and application to the phase stability of the quaternary Pu-U-Fe-Ga system discussed [Moo19].

As experiments on actinide materials are costly, time consuming and require special training, the use of the developed thermodynamic database can help guiding new experiments to fully grasp the understanding of the Pu-Ga-based system by identifying composition and temperature ranges where maximum information can be obtained with minimum experimental effort to further improve and/or validate the proposed thermodynamic database.

L'établissement des diagrammes de phases et la prévision des transformations de phases d'alliages multi-composants complexes représentent un enjeu majeur en science des matériaux, d'autant plus lorsqu'il s'agit de matériaux nucléaires. Depuis plus de 50 ans, la méthode semi-phénoménologique CALPHAD (CALculation of PHase Diagrams) a démontré sa capacité à optimiser les propriétés thermodynamiques d'alliages multi-composants complexes. L'objectif de ce projet est d'une part de développer, à l'aide de données énergétiques *ab initio*, une base de données thermodynamiques intégrant les diagrammes de phases d'une série d'alliages de base Pu-Ga et d'autre part d'apporter une aide au dimensionnement des expérimentations permettant de valider cette base de données.

Pu-(U)-Ga. Le diagramme de phase du système Pu-U a été ré-optimisé avec succès [Per14] grâce à une recherche bibliographique exhaustive sur la stabilité de phase, ainsi qu'une reformulation de la description énergétique *ab initio* de la phase cubique centrée dans le référentiel CALPHAD. Les fonctions thermodynamiques du système PuU ont ensuite été combinées avec celles des systèmes Pu-Ga et U-Ga afin de pouvoir décrire le système ternaire Pu-U-Ga, qui demeurait inexistant dans la littérature jusqu'à cette étude [Per14]. Les premiers résultats obtenus par cette approche CALPHAD indiquent qu'une faible quantité d'U perturbe la stabilité de la phase δ des alliages Pu-Ga, par la formation de précipités des phases η et ζ qui sont aussi susceptibles d'impacter le gonflement et l'intégrité mécanique du matériau au cours de son vieillissement.

Pu-(U-Am-Al)-Ga. L'optimisation des données thermodynamiques du système Pu-U-Am, fondée sur des données *ab initio*, a été réalisée en reformulant, dans le référentiel CALPHAD, les données énergétiques *ab initio* de la phase cubique face centrée et/ou cubique centrée des trois systèmes binaires Am-U, Pu-U et Am-Pu [Per15]. Les résultats obtenus prévoient une très faible miscibilité entre l'Am et l'U, ainsi qu'une lacune de miscibilité dans le domaine liquide à haute température. De plus, si le fort pouvoir δ -gène de l'Am a pu être confirmé dans le cas des alliages riches en Pu, il apparaît toutefois moins marqué pour les alliages riches en U. Par ailleurs, les optimisations CALPHAD du système Pu-Al (coexistence de 2 diagrammes), du diagramme de phase Am-Al (très peu connu), et du système Am-Ga (inconnu) ont été également réalisées. Cette avancée a permis le développement d'une nouvelle base de données thermodynamiques CALPHAD autonome incluant les éléments Al, Am, Ga, Pu et U [Per16]. L'influence des produits de décroissance du Pu (Am et U) a ainsi pu être évaluée dans le cas des alliages Pu-Al et Pu-Ga. L'étude de la stabilité des phases dans les systèmes ternaires et quaternaires a mis en évidence l'effet δ -gène des éléments Al, Ga et Am, ainsi que l'effet déstabilisant de l'U (favorisant la stabilité des phases η et ζ).

Pu-(U-Fe)-Ga. Une nouvelle base de données thermodynamiques CALPHAD autonome couvrant l'interaction des alliages d'actinides, tel que l'alliage Pu-Ga stabilisé δ , avec le fer (effets d'impuretés) a été développée [Moo19]. Les diagrammes de phases et les propriétés thermodynamiques des systèmes Pu-Fe et U-Fe ont été ré-optimisés avec une attention particulière portée aux domaines riches en actinides. Des calculs DFT (Density Functional Theory) ont permis de valider la stabilité et la stœchiométrie des composés (Pu,U)₆Fe et (Pu,U)Fe₂ par détermination théorique de leur enthalpie de formation. L'optimisation thermodynamique du système Fe-Ga a également été réalisée pour la première fois et son application à la stabilité du système quaternaire Pu-U-Fe-Ga a été discutée [Moo19].

Toute expérimentation sur actinides requière des investissements conséquents en termes de temps, de moyens techniques et financiers. L'utilisation de la base de données thermodynamiques développée dans le cadre de ce projet apparait de ce fait être une aide précieuse pour le dimensionnement des expérimentations permettant d'appréhender le comportement des systèmes à base Pu-Ga, notamment en identifiant les gammes de température et de composition présentant les meilleurs compromis entre la quantité/qualité d'informations accessibles et les efforts techniques à déployer, pour améliorer et/ou valider la base de données proposée.

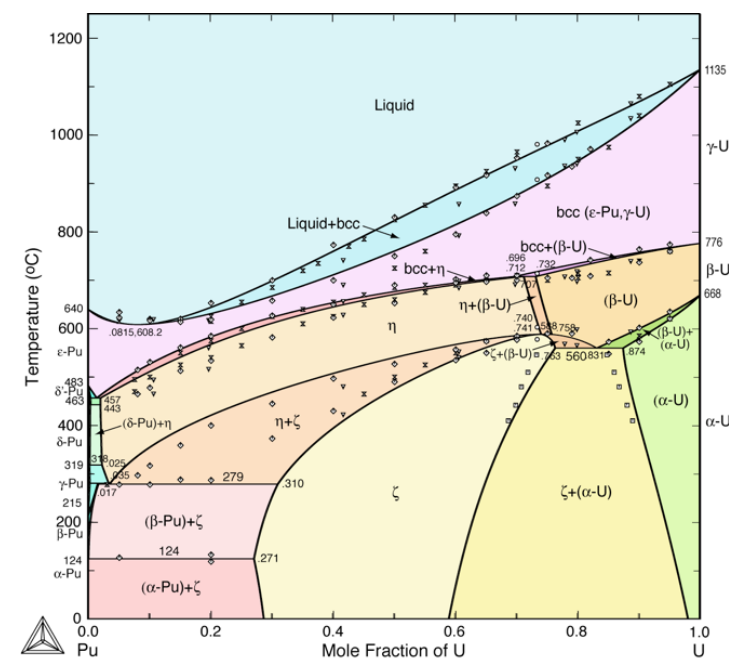


Figure 1.

Ab initio aided CALPHAD assessment of the Pu-U system [Per14]. The symbols represent experimental data from the literature.

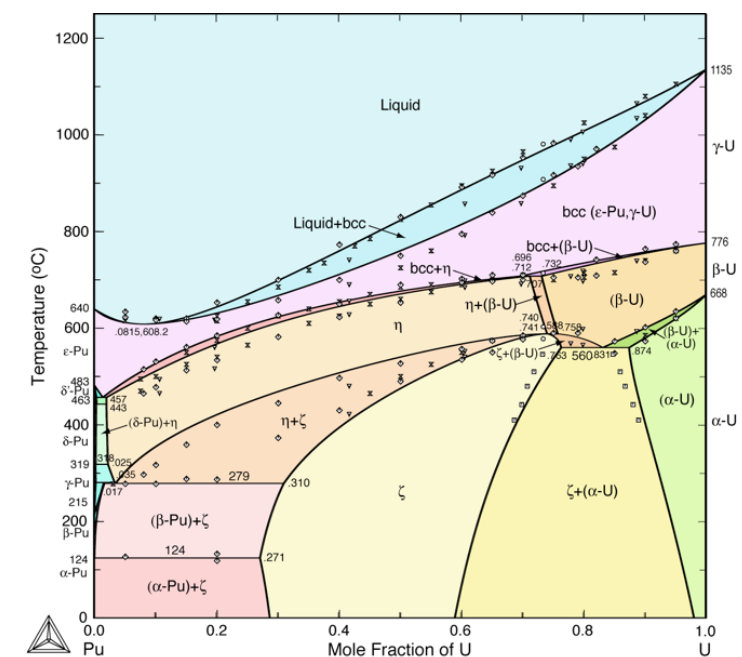


Figure 1

Optimisation CALPHAD du système Pu-U à partir de calculs *ab initio* [Per14]. Les symboles représentent les données expérimentales de la littérature.

CEA-DAM Île de France J. Clérouin, P. Arnault

Los Alamos National Laboratory L. Collins, C. Ticknor, J. Kress, A. White

The P184 collaboration was launched in 2012 around the orbital-free OFMD code shared between LANL and CEA/DAM/DIF. This approach allows for the description of systems (pure elements or mixtures) at temperatures of the order of several million Kelvin (hundreds of eVs) and densities of several times the normal density. Under these conditions matter can be fully ionized, as for a low atomic number element (hydrogen for example) or partially ionized as for a high atomic number Z element (tungsten, $Z=74$, for example). The ionization, which is not an input of the code, results from the self-consistent resolution of the electronic density with a density-only functional, at contrast with orbital based methods that are particularly expensive at high temperature. A few hundred atoms, of arbitrary Z, can be followed over a very long time, allowing for transport coefficient evaluation with a very good statistics.

The first tests on tungsten showed that, for a fixed density, the ionization evolves in such a way as to preserve the overall structure between 100 and 1000 eV, highlighting the Γ -plateau

mechanism [Cler13, Arna13, Cler14]. The OFMD calculations also allowed to validate effective approaches [Cler16] and to test Arnault's PIJ model for transport.

We then switched to two [Tick16] and three-component mixtures [Whit17, Cler20] which required many calculations provided by LANL. We have considered highly asymmetrical mixtures in Z such as hydrogen with silver (shown in Figure 1), over a wide range of temperatures (from 100 eV to a few keV). Starting from pure hydrogen, it was found that the addition of a high Z element considerably modified the transport properties of the mixture, strongly reducing the self-diffusion of the low Z element, the viscosity (see Figure 2 for an hydrogen-silver mixture), and the thermonuclear reactions rates [Cler17, Cler19, Arna19].

This collaboration also opened the door to comparison workshops organized by the NNSA, on transport coefficients in Albuquerque in 2016 [Gaff18], and on equations of state in Rochester in 2017 [Grab20].

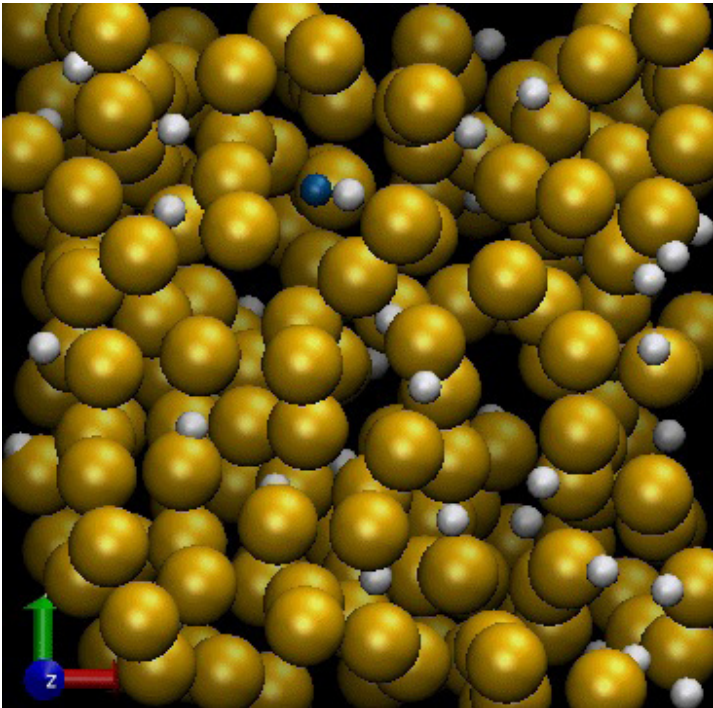


Figure 1
Hydrogen mixture (small gray balls) - silver (large golden balls) at 200 eV and 20 g/cm³.
Mélange hydrogène (petites boules grises) - argent (grosses boules dorées) à 200 eV et 20 g/cm³.

J. Clérouin, P. Arnault CEA-DAM Île de France

L. Collins, C. Ticknor, J. Kress, A. White Los Alamos National Laboratory

La collaboration P184 a été lancée en 2012 autour du code sans-orbitales OFMD partagé entre le laboratoire de Los-Alamos et le CEA/DAM/DIF. Cette approche permet de décrire de manière économique des systèmes (corps purs ou mélanges) à des températures de l'ordre de plusieurs millions de Kelvin (centaines d'eV) et des densités de plusieurs fois la densité normale. Dans ces conditions la matière est complètement ionisée s'il s'agit d'un élément de petit numéro atomique (l'hydrogène par exemple) ou partiellement ionisée s'il s'agit d'un élément de Z élevé (du tungstène, $Z=74$, par exemple). L'ionisation n'est pas une donnée d'entrée du code, mais résulte de la résolution auto-consistante de la densité électronique à l'aide d'une fonctionnelle de la seule densité, qui ne nécessite pas d'orbitales qui sont particulièrement coûteuses à haute température. On peut ainsi calculer la dynamique de plusieurs centaines d'atomes, de Z arbitraire, sur un temps très long, permettant ainsi d'accéder aux coefficients de transport avec une excellente statistique.

Les premiers essais sur du tungstène ont permis de montrer que, pour une densité fixée, l'ionisation s'adaptait de façon

à préserver la structure entre 100 et 1000 eV, mettant en évidence le mécanisme du Γ -plateau [Cler13, Arna13, Cler14]. Les calculs OFMD ont aussi permis de valider des approches effectives [Cler16] et de tester le modèle PIJ mis au point par P. Arnault, pour les coefficients de transport.

Nous sommes ensuite passés à des mélanges à deux composantes [Tick16] puis à trois [Whit17, Cler20] qui ont nécessité de nombreux calculs fournis par Los-Alamos. Nous avons considéré des mélanges très dissymétriques en Z comme de l'hydrogène avec de l'argent (Figure 1), sur une large gamme de températures (de 100 eV à quelques keV). Partant de l'hydrogène pur, on s'est aperçu que l'addition d'un élément de Z élevé modifiait considérablement les propriétés de transport du mélange, diminuant fortement la diffusion du léger, la viscosité (voire Figure 2 pour la viscosité d'un mélange hydrogène-argent), et les taux de réactions thermonucléaires [Cler17, Cler19, Arna19]. Cette collaboration a aussi ouvert la porte à des ateliers de comparaison organisés par la NNSA, sur les coefficients de transport à Albuquerque en 2016 [Grab20], et sur les équations d'état à Rochester en 2017 [Gaff18].

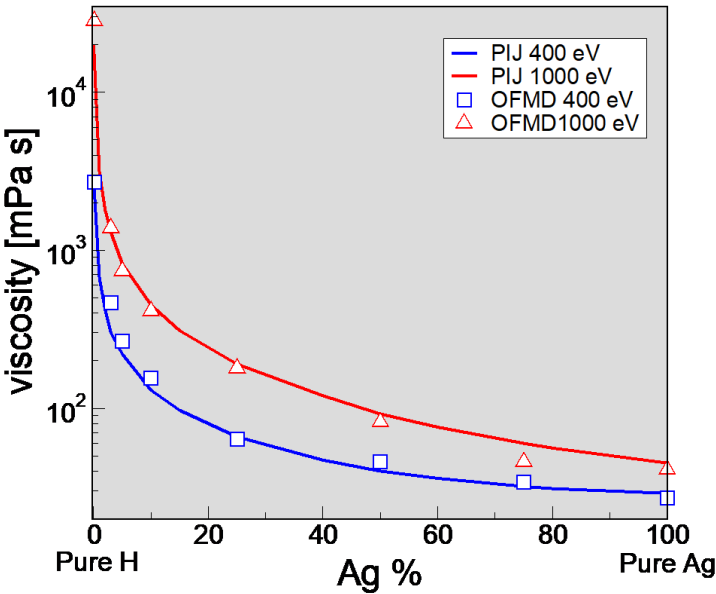


Figure 2
Viscosité d'un mélange hydrogène-argent en fonction de la concentration d'argent, à pression constante [voir Tick16].
Viscosity of a hydrogen-silver mixture versus silver concentration at constant pressure [see Tick16].

EFFECTS OF WHISTLER WAVES IN THE NEAR-EARTH ENVIRONMENT

CEA-DAM Île de France J.-F. Ripoll

Los Alamos National Laboratory G. S. Cunningham

At LANL and CEA - DAM whistler waves are studied because they interact with relativistic electrons trapped by the Earth's magnetic field in the Van Allen belts. These "killer" (MeV) electrons can damage spacecraft onboard electronics.

The NASA Van Allen Probes (RBSP) mission has produced a large high-quality database of the Van Allen belts, from 2012 to 2019. These observations, used in our computational codes and allied to our increasing computational power, have allowed us to advance our understanding and computations of the belts.

Figure 1 shows a 12 day period during which the electron flux gradually decays under the effect of whistler waves. Validation between observation and simulation shows good global accuracy [Rip18, Rip 17, Rip 16].

We also study whistler waves generated by lightning strokes and very low frequency (VLF) transmitters. Three studies on the lightning wave power have been published [Rip18a, Rip20, Rip21], with a fourth one in *Nature Communications* specific on the most powerful lightning, called superbolts, following one event from CEA station to RBSP in space [Rip21a]. The role of VLF transmitters is demonstrated in Figure 2 which shows the precipitated electron flux measured by the ESA PROBA-V satellite drastically increasing as the NWC Australian powerful transmitter emits at night [Cun20].

All these studies improve the robustness and credibility of the CEA DAM and LANL codes that simulate the near-Earth environment.

EFFETS DES ONDES DE MODE SIFFLEUR DANS L'ESPACE PROCHE DE LA TERRE

J.-F. Ripollt CEA-DAM Île de France

G. S. Cunningham Los Alamos National Laboratory

Il existe dans l'espace proche Terre des ondes électromagnétiques produites par le mouvement du plasma électronique spatial. Certaines de ces ondes, dites de mode siffleur pour le sifflement que leur signal acoustique produit, interagissent avec les électrons énergétiques piégés par le champ magnétique terrestre qui constituent les ceintures de Van Allen. Elles ont pour action bénéfique de précipiter ces électrons, dits tueurs d'électroniques, dans l'atmosphère et de réduire ainsi l'endommagement qu'ils causent à l'électronique embarquée des satellites. Au CEA - DAM comme au Los Alamos National Laboratory, ces études sont réalisées pour faire progresser la robustesse, la prévision et la crédibilité de nos codes d'environnement électromagnétique spatial.

La mission des Van Allen Probes (RBSP) de la NASA a produit une base de données très complète de l'environnement radiatif spatial de 2012 à 2019. Ces observations, traitées puis intégrées dans nos codes de calculs, couplées à la puissance de nos calculateurs, font progresser notre compréhension et nos calculs des ceintures de radiations. Un premier exemple est donné dans la Figure 1 (à gauche) qui montre des flux d'électrons évalués par des simulations (notées 3D) sur une

période de 12 jours durant lesquels le flux électronique décroît quotidiennement sous l'effet des ondes de mode siffleur. Leur puissance moyenne mesurée par RBSP est tracée à droite. Nous vérifions la prévision de ces calculs en les confrontant aux mesures expérimentales de RBSP (notées DATA) et démontrons ainsi une bonne précision globale de la diminution du flux sous l'effet des ondes [Rip18, Rip17, Rip16].

Nous avons également étudié les siffleurs générés par les éclairs et les transmetteurs très basse fréquence (VLF) terrestres pour leurs actions sur les électrons énergétiques. Plusieurs études sur la puissance des ondes des éclairs ont été publiées [Rip18a, Rip20, Rip21] dont une spécifique dans *Nature Communications* sur celles produites par les éclairs les plus puissants, ou superéclairs, en suivant un événement d'une station du CEA DAM jusqu'à l'espace via RBSP [Rip21a]. Le rôle des ondes émises par les transmetteurs VLF terrestres est quant à lui démontré dans la Figure 2 qui montre les flux d'électrons précipités dans l'atmosphère lorsque mesurés par le satellite PROBA-V de l'ESA: ces flux augmentent lorsque le puissant transmetteur australien NWC fonctionne de nuit, démontrant l'action positive de ces ondes [8].

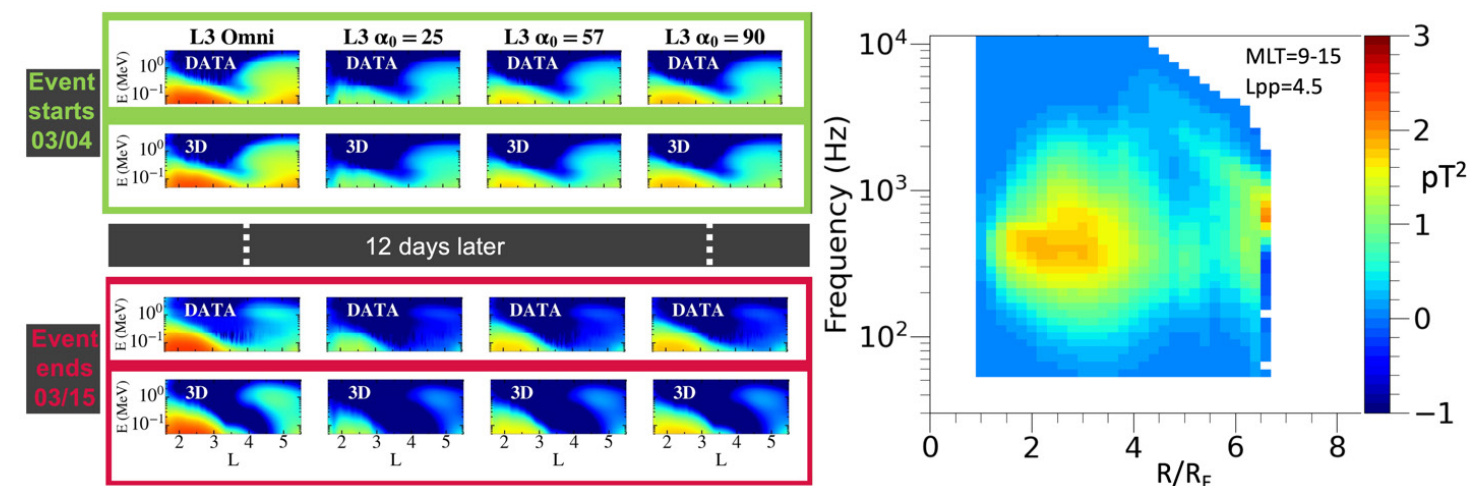


Figure 1
(left) electron flux (top) on 4 and (bottom) 15 March 2013 (DATA) observed by RBSP and (3D) simulated. (right) Whistler wave power reducing the electron flux plotted versus frequency and distance at the equator divided by the Earth radius (R_E -6400 km).

A gauche, la décroissance du flux d'électrons des ceintures du 4 mars 2013 (en haut) au 15 mars 2013 (en bas) observés par RBSP (noté DATA) et simulés (noté 3D). Les flux diminuent sous l'effet de la puissance (log10) des ondes de type siffleur mesurée dans l'espace, représentée à droite en fonction de leur fréquence et de la distance à l'équateur divisée par le rayon terrestre (R_E -6400 km).

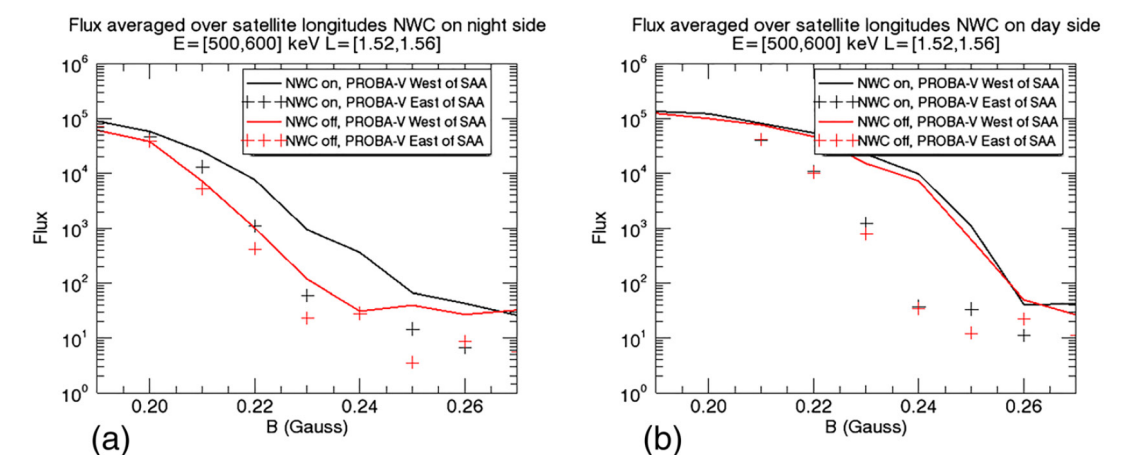


Figure 2.
A gauche, flux électronique quand le transmetteur fonctionne de nuit quand les ondes pénètrent l'ionosphère, à droite, de jour quand elles ne le peuvent pas. En noir, le transmetteur australien NWC fonctionne, en rouge, il est éteint. En fonctionnement et de nuit, le flux de particules précipitées dans l'atmosphère augmente aux longitudes prévues.

Flux of electrons when the transmitter NWC is on the (a) nightside, when the waves are able to penetrate through the ionosphere, and (b) dayside, when they are not. The black (resp. red) lines show the flux when the NWC transmitter is "on" (resp. "off") showing a clear signature when the PROBA-V satellite is at longitudes where the scattering from the transmitter is expected to be seen.

CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay

D. Regnier, N. Dubray

Lawrence Livermore National Laboratory

N. Schunck, M. Verriere, P. Marevic

More than 80 years after its discovery, achieving an accurate description of nuclear fission based exclusively on the laws of quantum mechanics remains a daunting task. Yet, such a theory is indispensable to simulate the temporal evolution of nuclear waste, design new generations of nuclear reactors or understand the synthesis of the elements in our universe. Building a microscopic theory of fission implies that many facets of femtometer-scale physics, each with its own source of complexity, must be treated simultaneously: quantum many-body problem for mesoscopic systems, nature of the effective nucleon-nucleon interaction, emergence of collectivity from intrinsic degrees of freedom, etc. This results in large-scale numerical problems that require the largest supercomputers in the world.

A close collaboration between CEA,DAM and LLNL, which started more than a decade ago, has been aiming at simulating the real-time dynamics of a nucleus during the fission process. Our method of choice is called the time-dependent generator coordinate method (TDGCM) [Ver20], which approximates nuclear dynamics by a Schrödinger equation in a space spanned by a few degrees of freedom often associated with nuclear deformations. This method is particularly well suited to predicting the distribution of various fission fragments properties. In the last decade,

our collaboration has co-developed and released an open-source TDGCM solver, which has popularized this theoretical approach [Reg16a, Reg18]. Figure 1 shows a snapshot of the time-evolution of the deformation probability in the fission of ^{240}Pu . This new tool allowed us to predict the fission fragment mass distributions in major actinides [Reg16b] and the transition between symmetric (two fragments of equal masses) an asymmetric fission in the fermium's isotopic chains [Reg19]. The development of a new method to determine the properties of the nascent fragments has enabled the first microscopic prediction of the mass and charge distribution [Ver21], see Figure 2, as well as of the angular momentum of the fragments [Mar21]. These observables are crucial inputs to better simulate the neutrons and gamma rays promptly emitted just after the nucleus splits (the scission point). Despite this progress, the dynamics of the system at the very point of scission remains out of reach for this theoretical approach. To overcome this limitation, our collaboration has undertaken innovative studies involving richer nuclear wavefunctions [Mar20] as well as machine learning algorithms to generate quantum states of interest. The recent publication of a general review article on the theory of nuclear fission is a testimony to the unique expertise shared by our two laboratories [Sch22].

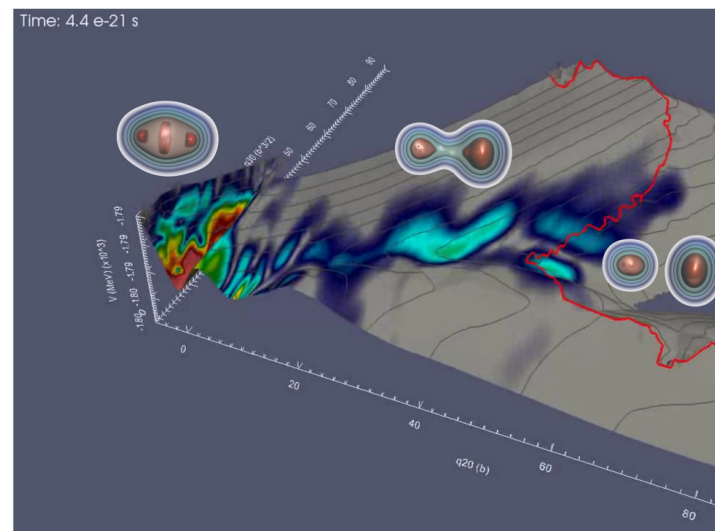


Figure 1

Potential energy surface involved in the simulation of the fission dynamics of ^{240}Pu . Each point corresponds nuclear configuration constrained in deformation. The colors indicate the probability for the nucleus to be in one of these configurations, from high probabilities (red colors) to low probabilities (blue colors).

Surface d'énergie potentielle entrant en jeu dans la simulation de la dynamique de la fission du ^{240}Pu . Chaque point correspond à une configuration nucléaire contrainte en déformation, dont la probabilité d'occupation est quantifiée par le code couleur (probabilités élevées : tons rouges, probabilités plus faibles : tons bleus).

D. Regnier, N. Dubray

CEA-DAM Île de France, Université Paris-Saclay

N. Schunck, M. Verriere, P. Marevic

Lawrence Livermore National Laboratory

Plus de 80 ans après la découverte du phénomène de fission nucléaire, en proposer une description robuste reposant exclusivement sur les lois de la mécanique quantique représente toujours un véritable défi. Sur le long terme, une telle théorie est pourtant indispensable afin de simuler précisément le vieillissement des déchets nucléaires, la criticité des nouvelles générations de réacteurs nucléaires, ou encore la formation des éléments dans l'univers. Construire une théorie purement microscopique de la fission implique de traiter simultanément de nombreux processus physiques intervenant à l'échelle du femtomètre, chacun ajoutant son degré de complexité : résolution du problème à N corps quantique et mésoscopique, traitement de l'interaction effective entre nucléons, émergence de comportements collectifs, etc. Il en résulte des descriptions théoriques caractérisées par d'importants coûts numériques, qui requièrent l'utilisation de supercalculateurs parmi les plus puissants au monde.

Une collaboration étroite entre le CEA,DAM et le LLNL s'attache depuis plus d'une dizaine d'années à simuler en temps réel la dynamique d'un noyau fissionnant. La méthode privilégiée à ce jour est celle des coordonnées génératrices dépendante du temps (TDGCM) [Ver20] qui approxime la dynamique nucléaire par une équation de Schrödinger dans un espace collectif défini par un petit nombre de degrés de liberté associés aux déformations du noyau. La TDGCM est particulièrement adaptée pour prédire les distributions des propriétés des fragments de fission. Ces dix dernières années ont vu le codéveloppement et la mise à disposition par notre collaboration d'un code de résolution TDGCM ayant eu pour effet de démocratiser cette méthode [Reg16a, Reg18]. La Figure 1 représente une « photographie » à un instant t de l'évolution temporelle de la probabilité de déformation dans le ^{240}Pu obtenue

avec ce code. Ce nouvel outil nous a permis de prédire les distributions en masse des actinides majeurs [Reg16b] ainsi que la transition depuis des fissions essentiellement symétriques (deux fragments de même masse) vers des fissions asymétriques dans la chaîne isotopique des fermiums [Reg19]. Le développement d'une nouvelle méthode pour déterminer les propriétés des fragments primaires a permis la première prédiction microscopique des distributions en masse et en charge des fragments de fission [Ver21], voir Figure 2, et, plus récemment, de leur moment angulaire [Mar21]. Ces observables fournissent des données d'entrée essentielles pour caractériser l'émission des neutrons et rayons gamma qui suivent immédiatement la rupture du noyau (la scission). Malgré ces avancées, la dynamique du système à la scission demeure hors de la zone de validité de ce type de modélisation. Pour aller au-delà, notre collaboration mène plusieurs séries de travaux innovants qui visent à enrichir les états quantiques considérés [Mar20] ainsi qu'à les générer à partir d'algorithmes d'apprentissage automatique. La publication récente d'un article de revue sur la théorie de la fission nucléaire [Sch22] témoigne de l'expertise unique partagée entre les deux laboratoires.

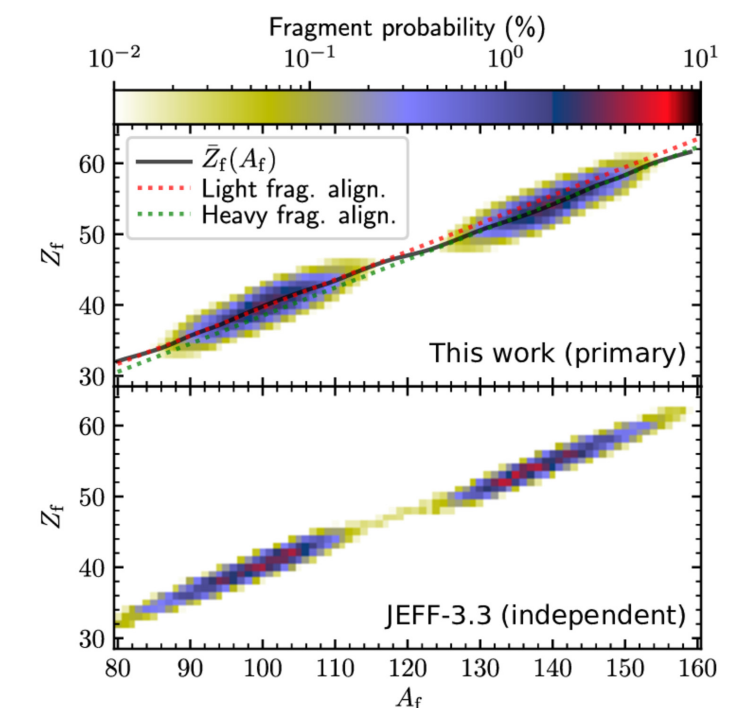


Figure 2

Distribution en masse et en charge des fragments de fission prédite via l'approche des coordonnées génératrices dépendante du temps [Ver21].

Mass and charge distribution of the fission fragments predicted with the time-dependent generator coordinate method [Ver21].

MEASUREMENT OF SHORT-LIVED ISOMERS IN THE RADIATIVE CAPTURE AND FISSION REACTIONS

CEA-DAM Île de France

Los Alamos National Laboratory

Some of the atomic nuclei exhibit metastable (isomeric) states which are characterized by hindered gamma-ray emission to the lower-lying levels. The isomers half-lives are much longer than the classical half-life of a nuclear state and can range from ps and ns to days or even years. Due to the structure of the nucleus, some of the isomers have exceptionally high spin than the lower-lying states while others are associated to major changes in the shape of the nucleus. Measurement of isomeric states populated in neutron capture or fission can be used as a tool for (i) selecting gamma-ray cascades feeding an isomer and (ii) identifying late-time emission gamma rays de-exciting the isomers. Both approaches lead to determining the population of the isomers and benchmarking codes that calculate the gamma-ray emission from the statistical model. We carried out three experiments $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$, $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ and $^{235}\text{U}(n,f)$, and $^{252}\text{Cf}(sf)$ focused on population and de-excitation of isomeric states.

We performed the experiments with the DANCE gamma-ray calorimeter installed at flight path 14 of the Manuel Lujan Jr. Neutron Scattering Center of LANL. The $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ measurement was carried out with the standard configuration of DANCE, while the measurements with the fissile targets used the neutron detector NEUANCE [Jan18] installed in the central cavity of DANCE to provide a signal when fission occurred.

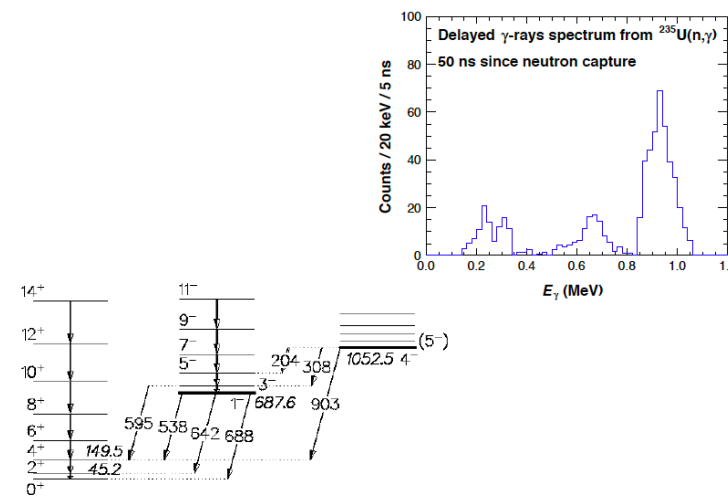


Figure 1
A partial level scheme of ^{236}U (left) showing the transitions de-exciting the two isomers at 687.6 and 1052.5 keV. A spectrum of late rays (right) de-exciting the isomeric state at 1052.5 keV at 50 ns since the $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ reaction occurred. Figures taken from [Rus21].

Schéma de niveaux partiel de ^{236}U (à gauche) montrant les transitions associées aux deux isomères à 687.5 keV et 1052.5 keV. Un spectre des raies gamma retardées désexcitant l'état isomère à 1052.5 keV 50 ns après que la réaction $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ a eu lieu est représenté à droite.

O. Roig, D. Denis-Petit, A. Ebran, A. Francheteau, L. Gaudefroy, V. Méot, B. Morillon, P. Romain, G. Rusev, E. M. Bond, T. A. Bredeweg, A. J. Couture, M. Jandel, T. Kawano, S. Mosby, J. M. O'Donnell, P. Talou, J. L. Ullmann

Isomeric ratios for two of the isomers in ^{177}Lu with $T_{1/2}=10.8$ and 33 ns have been measured from the $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ reaction [Den16] using the 1088 keV and 762 keV gamma-rays, respectively. Energy and time spectra are shown in Figure 1. The isotopically enriched ^{176}Lu target was prepared using the mass spectrometer SIDONIE in Orsay. The isomeric ratios and prompt gamma spectrum were compared with TALYS [Kon19] calculations revealing the need to include a low-energy M1 resonance in the gamma-ray strength function to reproduce the experimental dataset. Another study of the gamma-ray strength functions combined a 4π detector array at CEA/DIF made of 54 NaI crystals with an ionization chamber built at CEA Bruyères-le-Châtel, which allows for the selection of specific fission fragments exhibiting suitable isomers emitted in the spontaneous fission of ^{252}Cf . A similar experiment, featuring the same ionization chamber inside DANCE, is in progress. A test measurement with a $^{252}\text{Cf}(sf)$ source was carried out in May 2022.

We studied the gamma-ray emission delayed by the two isomers in ^{236}U of 3.78 and 100 ns half lives by measuring the $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ reaction with DANCE [Rus21]. In order to remove the accidental background, we applied a method [Don16] developed for experiments with the multidetector system Chi-Nu at LANL. An examples spectrum of the de-excitation gamma rays 50 ns after the $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ reaction occurred is shown in Figure 1. Despite the modest energy resolution of DANCE, we are able to identify the de-excitation transitions and measure the population and half-life of the isomers.

Applying the same method for accidental background correction to the fission events identified by NEUANCE, we measured the energy spectrum of late emission prompt fission gamma rays as a function of time since fission for the $^{235}\text{U}(n,f)$ and $^{252}\text{Cf}(sf)$ reactions [Rus20]. Results from $^{252}\text{Cf}(sf)$ show that DANCE and CGMF agree fairly well with a few exceptions due to either insufficient data on isomers from the various fission fragments or incorrect population for some of them. In addition, the measured spectrum shows high intensity at early times, which indicates the presence of unknown isomers with short half-lives up to 10 ns.

It appears that classical calculations using reactions models do not agree well with our measurements. Therefore, we will work on improving the main parameters of the models, like gamma-ray strength functions and level densities, to achieve better description of gamma-ray cascades feeding the isomers and reproduce the isomer population.

MESURES D'ISOMÈRES À VIE COURTE PRODUITS LORS DES RÉACTIONS DE FISSION ET DE CAPTURE RADIATIVE

O. Roig, D. Denis-Petit, A. Ebran, A. Francheteau,

L. Gaudefroy, V. Méot, B. Morillon, P. Romain

G. Rusev, E. M. Bond, T. A. Bredeweg, A. J. Couture,

M. Jandel, T. Kawano, S. Mosby, J. M. O'Donnell, P. Talou,

J. L. Ullmann

Le noyau atomique peut présenter des états d'excitation métastables, appelés isomères, qui ont la particularité de montrer une émission de rayonnement gamma retardée vers des états de plus faible énergies. Les demi-vies de ces isomères sont bien plus longues que le temps de vie habituel des états nucléaires classiques (de 10^{-15} - 10^{-18} s) puisqu'ils montrent des durées de vie comprises entre la picoseconde et plusieurs heures voire des jours ou des années. Ce ralentissement majeur de leur désexcitation est dû à la structure du noyau. Ces états isomères sont généralement caractérisés par un spin bien plus haut que les états avoisinants de plus faible énergie ou présentent des formes associées très différentes. La mesure de ces isomères n'est pas seulement intéressante d'un point de vue de l'étude de la structure nucléaire. On peut utiliser cette spécificité pour sélectionner des cascades gamma promptes de peuplement de ces isomères en identifiant l'émission retardée propre à ces isomères dans les réactions de capture radiative ou de fission. On détermine la population de ces isomères notamment dans les réactions de capture radiative ou de fission de manière à tester les modèles de peuplement des états nucléaires dans ces réactions et leur désexcitation via le modèle statistique. Nous avons entrepris trois types d'expériences sur les $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$, $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ et $^{235}\text{U}(n,f)$, et $^{252}\text{Cf}(sf)$ en se focalisant sur la mesure de population de ces états isomères et de spectres conduisant à ces états.

Nous avons réalisé ces expériences à l'aide du calorimètre gamma DANCE installé sur la ligne FP14 du Manuel Lujan Jr. Neutron Scattering Center de LANL. La mesure de la réaction $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ a été réalisée avec une configuration standard de DANCE tandis que celles qui utilisent des cibles d'actinides ont tiré, en outre, parti du détecteur de neutrons NEUANCE [Jan18] installé au centre de la cavité de DANCE pour fournir un signal additionnel quand la réaction de fission avait lieu.

Les rapports isomères, pourcentage de cascades gamma aboutissant à des isomères, ont été mesurés dans la réaction $^{176}\text{Lu}(n,\gamma)$ pour deux isomères du ^{177}Lu de demi-vie $T_{1/2}=10.8$ et 33 ns et émettant des rayonnements gamma retardés à 1088 keV et 762 keV, (cf. Figure 1). La cible utilisée de ^{176}Lu particulièrement pure isotopiquement, >99.99%, a été fabriquée à l'aide du séparateur isotopique SIDONIE installé à Orsay au IJCLab. Les rapports isomères et les spectres prompts d'alimentation des isomères ont été comparés à des calculs effectués avec le code TALYS [Kon19] révélant la nécessité d'inclure une résonance M1 de basse énergie à la fonction de force gamma [Den16].

D'autres études sur ces fonctions de force gamma pour d'autres noyaux sont en cours. Pour cela, une chambre à ionisation construite au CEA/DIF, contenant une cible très fine de ^{252}Cf , a été insérée au centre d'un ensemble de 54 détecteurs NaI. Une sélection des fragments de fission est réalisée à l'aide de

CEA-DAM Île de France

Los Alamos National Laboratory

la chambre d'ionisation et des détecteurs NaI afin d'obtenir les spectres prompts d'alimentation de ces isomères. Des premiers tests de la chambre d'ionisation au centre de DANCE ont été réalisés en 2022 afin d'étendre ces études à d'autres actinides.

Nous avons étudié aussi les émissions gamma retardés de deux isomères de l'isotope ^{236}U de demi-vies $T_{1/2}=3.78$ et 100 ns mesurés dans la réaction $^{235}\text{U}(n,\gamma)$ avec DANCE [Rus21] (cf. Figure 2). Afin de retirer le bruit de fond fortuit, nous avons appliqué la méthode [Don16] développée pour les expériences avec le système multi-détecteur Chi-Nu au LANL. Nous avons pu identifier les transitions de désexcitation et mesurer les populations et les demi-vies de ces isomères.

Appliquant cette méthode de soustraction de bruit de fond fortuit aux événements de fission identifiés avec le détecteur NEUANCE, nous avons mesuré les spectres des émissions retardées des rayonnements gamma de fission en fonction du temps pour les réactions $^{235}\text{U}(n,f)$ et $^{252}\text{Cf}(sf)$ [Rus20]. Ces résultats pour le $^{252}\text{Cf}(sf)$ montrent que les données mesurées par DANCE et calculées avec le code CGMF sont en bon accord à quelques exceptions près dues à un manque d'information sur les isomères de quelques fragments de fission ou d'incorrects taux d'alimentation de ceux-ci. En outre, le spectre mesuré à des temps très courts est trouvé très intense signifiant la présence probable de plusieurs isomères de demi-vies inférieures à 10 ns pour le ^{252}Cf .

Des comparaisons avec les modèles de réactions ont été effectuées. L'accord sur l'alimentation de ces isomères lors de la cascade gamma de désexcitation qui suit les réactions de capture radiative est perfectible. Des développements supplémentaires ayant trait aux ingrédients de ces modèles, particulièrement la fonction de force gamma et la densité de niveaux, ont été lancés afin de décrire plus précisément ces mesures avec les isomères.

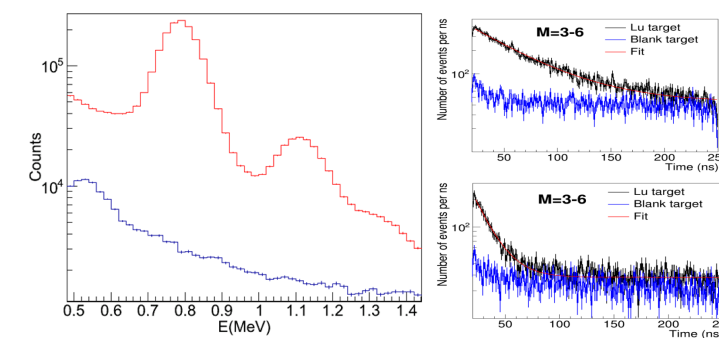


Figure 2
Spectre gamma zoomé sur les raies gamma de décroissance des isomères et la mesure de leurs temps de vie.

Gamma spectrum focused on two gamma-rays from isomers decays and their measured lifetime.

CEA-DAM: Le Ripault, Île de France

Los Alamos National Laboratory
Lawrence Livermore National Laboratory

Additive manufacturing is attractive for creating materials with properties not achievable using traditional means. These include materials that have unprecedented strength-to-density ratios, and thermal management properties. This project focuses on development of additively manufactured porous structures – by development of printing feedstocks, topological architectures, and printing methods – and modeling of this unique class of materials from quasi-static to dynamic (shock) conditions. We have previously shown that shockwave localization is dictated by topological structure in AM cellular materials [Bra17, Bra19].

A variety of AM feedstocks or inks have been prepared with different mechanical properties [Tal20, Lee22]. These have included Al_2O_3 /PDMS, graphite/PDMS, and TiO_2 /PDMS filled polymer composites. The storage modulus for these individual inks span from 110 MPa to 452 MPa across the series. Cellular architectures of simple cubic and face-centered tetragonal geometries were printed by the direct ink write method, and the resulting structures were shown to have different mechanical properties depending on the filler material. In the figure, stress-strain curves for simple cubic structures (a) of Al_2O_3 /PDMS (red), graphite/PDMS (blue), and TiO_2 /PDMS (black) are shown. In the simple cubic geometry, the load-deflection behavior was found to be tunable, with the Al_2O_3 /PDMS formulation showing the

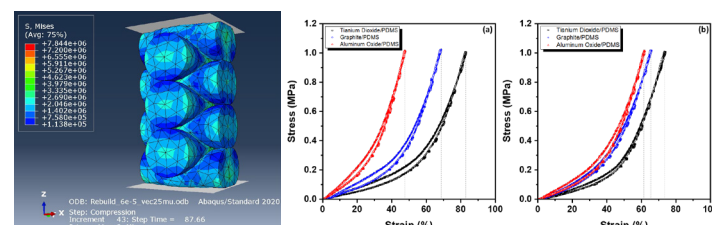


Figure 1
At right, stress-strain curves for simple cubic structures (a) of Al_2O_3 /PDMS (red), graphite/PDMS (blue), and TiO_2 /PDMS (black). In the simple cubic geometry, the load-deflection behavior was found to be tunable, with the Al_2O_3 /PDMS formulation showing the stiffest response. In a face-centered tetragonal architecture, the differences between compressive response were not as great, but still showed the same trend with filler composition. At left, a view of the unit cell under compression using Abaqus/Explicit.

À droite, les courbes de contrainte-déformation pour des structures cubiques simples (a) de Al_2O_3 /PDMS (rouge), de graphite/PDMS (bleu) et TiO_2 /PDMS (noir). Dans la géométrie cubique simple, le comportement charge-déflexion est ajustable avec la formulation d' Al_2O_3 /PDMS qui présente la réponse la plus rigide. Dans une architecture quadratique à faces centrées, les différences entre les réponses à la compression n'étaient pas aussi importantes, mais elles ont montré la même tendance avec la composition de la charge. À gauche, une vue de la cellule unitaire sous compression avec Abaqus/Explicit.

S. Chupin, D. Rochais, Ph. Belleville, Y. Scaringella-Guerriat, L. Soulard
D. Dattelbaum, K.-S. Lee, M. Lewis
M. Kumar, J. Lind

stiffest response. In a face-centered tetragonal architecture, the differences between compressive response were not as great, but still showed the same trend with filler composition. Similar results were found by dynamic mechanical analysis, with the Al_2O_3 -filled PDMS showing the stiffest response.

An effort also was initiated to evaluate the finite-element code ABAQUS as a solver for iterations in topological optimization [Lee22]. Bulk properties of the filled PDMS inks were measured, and a hyperelastic model was parameterized for each ink. Abaqus/standard was found to be unable to resolve the complicated 3-D contacts in the AM structures at moderate to large deformations. Abaqus/Explicit, for dynamic problems, was able to resolve the contacts and reproduce the stress-strain behavior of the structures. A view of the unit cell under compression is also shown in the Figure, and the Abaqus/Explicit simulations were able to replicate the polymer response over a range of strains, strain rates and cyclic compression with the parameterized Mullins, hyperelastic, and hysteresis models [Lee22].

Extension to the dynamic (shock) regime was accomplished by gas gun-driven plate impact experiments diagnosed with time-resolved X-ray phase contrast imaging at the Advanced Photon Source (Chicago, IL) [Tal20]. The ligament material or filler composition was found to have an influence on shock-wave induced structural deformation and jetting at high strain rates. Graphite, as a filler, was found to break up the articulated jets in the simple cubic geometry and show a slower mass (particle) velocity likely due to the size of the graphite aggregates, while TiO_2 filler in PDMS showed the most ductile response. This work was extended to study shockwave propagation in a simple cubic topology with ceramic ligaments (Figure 2). Experiments were performed in two orientations at ~300 m/s impact velocities. In contrast to the filled polymer networks, the ceramic is observed to pulverize as the shock transits the unit cell, resulting in diffuse ejecta moving through the open channels of the structure. Characterization of the feedstock material and sample optimization is required to understand how strength and brittleness give rise to strong jets from localized deformation in the AM structure.

Future work under this collaboration will include studying ceramic AM structures to better understand structure and material properties effects on quasi-static and dynamic responses. The objectives of this ongoing study are to develop formulations of photosensitive resins to create targeted open structures, to characterize as-made objects and compare the experimental properties with those predicted numerically. The importance of the resin formulation on the properties of the printed objects will be highlighted.^{6,7}

S. Chupin, D. Rochais, Ph. Belleville, Y. Scaringella-Guerriat, L. Soulard
D. Dattelbaum, K.-S. Lee, M. Lewis
M. Kumar, J. Lind

La fabrication additive (FA) apporte tout son intérêt lorsqu'il s'agit de créer des matériaux dont les propriétés ne peuvent être obtenues par des moyens conventionnels. Le projet P191 se concentre sur le développement de structures poreuses fabriquées de manière additive – grâce au développement de matières premières d'impression, d'architectures topologiques et de méthodes d'impression - et grâce à la modélisation de cette classe de matériaux dans des conditions quasi-statiques ou dynamiques (chocs). Nous avons précédemment montré que la localisation de l'onde de choc est gouvernée par la structure topologique des matériaux cellulaires réalisés en impression 3D [Bra17, Bra19].

Diverses matières premières ou des encres pour l'impression 3D ont été préparées avec des propriétés mécaniques différentes [Tal20, Lee22]. Il s'agit notamment de composites polymères chargés avec des mélanges Al_2O_3 /PDMS, graphite/PDMS et TiO_2 /PDMS. Le module élastique de ces encres individuelles varie de 110 MPa à 452 MPa pour l'ensemble de la série. Des architectures cellulaires de géométries cubiques simples et quadratiques à faces centrées ont été imprimées par la méthode d'écriture directe (DIW), et on montre que les structures résultantes ont des propriétés mécaniques différentes selon le matériau utilisé pour charger l'encre. La Figure 1 montre les courbes de contrainte-déformation pour des structures cubiques simples (a) en Al_2O_3 /PDMS (rouge), graphite/PDMS (bleu) et TiO_2 /PDMS (noir).

Dans la géométrie cubique simple, le comportement mécanique en compression s'est révélé modulable, la formulation Al_2O_3 /PDMS présentant la réponse la plus rigide. Dans une architecture quadratique à faces centrées, ces différences n'étaient pas aussi importantes, mais présentaient toujours la même tendance avec la composition de la charge. La caractérisation dynamique a donné des résultats similaires, le PDMS chargé à base d' Al_2O_3 présentant la réponse la plus rigide.

Une action a également été menée pour évaluer le code éléments finis ABAQUS comme solveur pour une étape d'optimisation topologique [Lee22]. Les propriétés des encres à base de PDMS chargées ont été mesurées et un modèle hyperélastique a été utilisé pour chacune des encres. Abaqus en version standard s'est révélé incapable de résoudre la complexité des contacts 3D pour des déformations modérées à importantes. Abaqus en version Explicit, dans les configurations dynamiques, a permis de résoudre les contacts et reproduire le comportement contrainte-déformation des structures. Une vue de la cellule unitaire en compression est présentée dans la Figure 2. Les simulations Abaqus/Explicit rendent compte de la réponse du polymère sur une gamme de déformations variée, pour différents taux de déformation et de compression cyclique en utilisant les modèles hyperélastiques et d'hystérésis avec paramètres de Mullins [Lee22].

CEA-DAM: Le Ripault, Île de France

Los Alamos National Laboratory
Lawrence Livermore National Laboratory

Les caractérisations en régime dynamique (de choc) ont été menées à l'aide d'expériences d'impact de plaque avec un canon à gaz équipé de diagnostics d'imagerie par contraste de phase à rayons X résolue en temps à l'Advanced Photon Source (Chicago, IL) [Tal20]. On a constaté que le matériau constitutif ou la nature de la charge avaient une influence sur la déformation structurale et la fragmentation induite par l'onde de choc, pour des taux de déformation élevés. On a constaté que le graphite, utilisé comme matériau de charge, brisait les ejecta dans la géométrie cubique simple et présentait une vitesse de particules plus lente, probablement due à la taille des agrégats de graphite, tandis que les structures PDMS chargées TiO_2 présentaient la réponse la plus ductile. Ce travail a été poursuivi en étudiant la propagation de l'onde de choc dans une topologie cubique simple avec des ligaments céramiques (voir Figure 2). Les expériences ont été effectuées dans deux orientations différentes avec des vitesses d'impact de l'ordre de 300 m/s. Contrairement aux structures polymériques chargées, on observe que la céramique se fracture lorsque le choc traverse la cellule unitaire, ce qui entraîne des ejecta diffus qui se propagent dans les porosités ouvertes de la structure. Une caractérisation du matériau de départ et une optimisation de l'échantillon sont nécessaires pour mieux comprendre comment les propriétés des matériaux (résistance et fragilité) donnent lieu à des ejecta énergétiques à partir d'une déformation localisée de la structure FA.

Les travaux à venir dans le cadre de cette collaboration comprennent l'étude des structures FA en céramique afin de comprendre les effets de la structure et des propriétés des matériaux sur les réponses mécaniques quasi-statiques et dynamiques. Les objectifs sont de développer des formulations de résines photosensibles céramiques pour créer des structures ouvertes idoines, de caractériser les éprouvettes fabriquées et de comparer les propriétés expérimentales avec celles prédites numériquement. L'importance de la formulation de la résine sur les propriétés des structures imprimées sera mise en évidence.^{6,7}

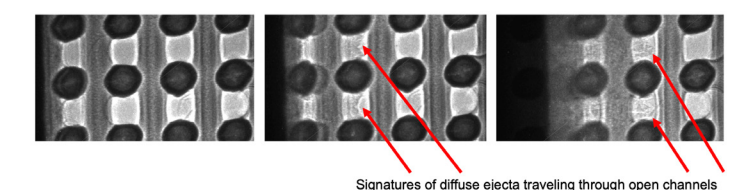


Figure 2
Images de contraste de phase aux rayons X impactée à ~ 300 m/s. La pulvérisation des ligaments de la céramique est observée lors de la propagation de l'onde de choc de gauche à droite, et des ejecta diffus sont observés dans les canaux ouverts.

X-ray phase contrast images impacted at ~ 300 m/s. Pulverization of the ceramic ligaments is observed as the shockwave propagates from left to right, and signatures of diffuse ejecta are observed in the open channels.

LASER SHOCK COMPRESSION OF HYDROGEN AND HELIUM TO DEEP PLANETARY CONDITIONS

CEA-DAM Île de France S. Brygoo, P. Loubeyre, F. Occelli

Lawrence Livermore National Laboratory P. M. Celliers, J. H. Eggert, D. Fratanduono, M. Millot, Y.-J. Kim

When this collaboration started more than fifteen years ago, the experimental knowledge on Hydrogen/Helium warm dense systems was obtained from the dynamic compression of H₂/D₂/He cryo-targets, essentially by measuring their principal Hugoniot curves. Since the density compression along the Hugoniot is limited to a factor about 4, the states so obtained were not dense enough and too hot to fall on planetary interior profiles. The goal of this collaboration team, including scientists from LLNL, CEA, UC Berkeley and the University of Rochester, has continuously been to push the measurements of the properties of hydrogen/helium systems at higher densities, by designing novel experimental approaches to go off the principal Hugoniot.

Two types of experiments were designed and optimized, the first one based on the concept of the Diamond Anvil Cell (DAC) targets and the other one using multi-shocks compression. In both cases, two diagnostics, the Velocity Interferometer for Any Reflector (VISAR) and the Streaked Optical Pyrometry (SOP), are used to document the shock velocities, the thermal and optical properties during the shock compression.

The DAC targets offer two new opportunities over the usual cryogenic targets: i) the initial density can be significantly increased, by a factor 3 for an initial pressure of 4 GPa and by 8 for 20 GPa; ii) mixtures of hydrogen-helium remain homogeneous for pre-compression up to 5 GPa whereas they

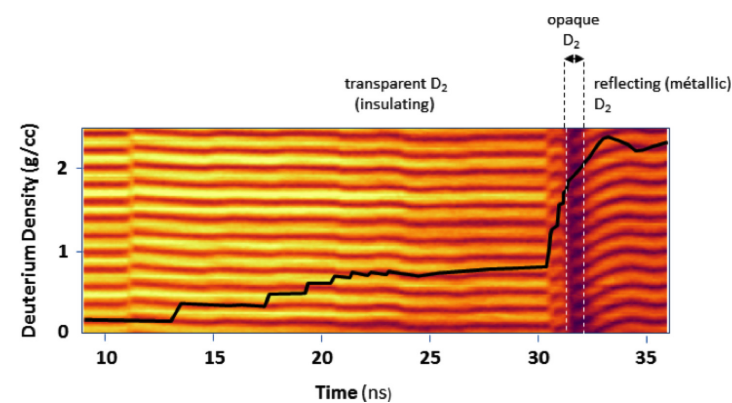


Figure 1
Multi-shocks compression of a cryo-target of deuterium at the National Ignition Facility which revealed how fluid hydrogen transforms into the metal for temperature below 2000K, as published in Science [Cel18]. The thermodynamical states are obtained from hydro-simulation (solid dark line).

Compression multi-chocs d'une cryo-cible de deutérium au National Ignition Facility qui a révélé comment l'hydrogène fluide se transforme en métal pour une température inférieure à 2000K (Science [Cel18]). Les états thermodynamiques sont obtenus à partir d'hydro-simulation (trait noir plein).

phase separate in a cryo-target. The associated Hugoniot of these dense initial mixture states is then accessing the conditions of deep planetary interior. Furthermore, the Rankine-Hugoniot conservation equations can be applied to obtain the pressure, density and Energy of the shocked states from the shock velocity measurements. Figure 1 summarizes the main results of this collaborative effort: The transition to conducting helium; the Equation of State data of warm dense helium, hydrogen and their mixtures; the evidence of phase separation under Jupiter interior conditions. The feasibility of DAC targets has also recently been demonstrated on NIF facility and DACs loaded with helium at 20 GPa, will be fielded soon to search for the insulator-metallic transition in warm dense helium at conditions of white dwarfs envelope.

Taking advantage of the unique capability of NIF to deliver precisely tailored laser pulse shapes, the team successfully demonstrated reverberating shock compression of cryogenic hydrogen and deuterium fluids reaching more than 800 GPa (8 million atmospheres) while keeping the temperature near 1000-2000 K. As seen in Figure 2, analysis of the VISAR data revealed with great details how the two different hydrogen isotopes transforms first into an opaque fluid before becoming a shiny metal at higher pressure. This detailed study provides essential benchmarks for advanced theory and computer simulation of quantum materials such as density functional theory and quantum Monte-Carlo techniques. The team is now preparing another publication to describe additional experiments on hydrogen, thus revealing how the quantum dynamics of the hydrogen nuclei affects the insulator to metal transition in the fluid [Lou04, Egg08, Cel10, Lou12, Bry15, Bry21].

LES INTÉRIEURS PLANÉTAIRES ÉTUDIÉS PAR DES EXPERIENCES SUR L'HYDROGÈNE ET L'HÉLIUM COMPRIMÉS PAR LASER

S. Brygoo, P. Loubeyre, F. Occelli CEA-DAM Île de France

P. M. Celliers, J. H. Eggert, D. Fratanduono, M. Millot, Y.-J. Kim Larence Livermore National Laboratory

Les intérieurs planétaires étudiés par des expériences sur l'hydrogène et l'hélium comprimés par laser.

Au début de cette collaboration il y a plus de quinze ans, les connaissances expérimentales sur les systèmes denses chauds Hydrogène/Hélium étaient issues de la compression dynamique de cryo-cibles H₂/D₂/He, essentiellement par la mesure de leurs courbes d'Hugoniot principales. La compression le long de l'Hugoniot étant limitée à un facteur 4 environ, les états ainsi obtenus n'étaient pas pertinents pour les intérieurs planétaires (pas assez denses et trop chauds). L'objectif de cette collaboration, comprenant des scientifiques du LLNL, du CEA, de l'UC Berkeley et de l'Université de Rochester, a été de pousser en permanence les mesures des propriétés des systèmes hydrogène/hélium à des densités plus élevées, en concevant de nouvelles approches expérimentales pour sortir de l'Hugoniot principal. Deux types d'expériences ont été conçues et optimisées, la première basée sur le concept des cibles à cellules en enclume de diamant (DAC en anglais) et l'autre utilisant la compression multi-chocs. Dans les deux cas, deux diagnostics, le Velocity Interferometer for Any Reflector (VISAR) et le Streaked Optical Pyrometry (SOP), sont utilisés pour documenter les vitesses de choc, les propriétés thermiques et optiques lors de la compression du choc.

Les cibles DAC offrent deux nouvelles opportunités par rapport aux cibles cryogéniques habituelles : i) la densité initiale peut être significativement augmentée, d'un facteur 3 pour une pression initiale de 4 GPa et de 8 pour 20 GPa ; ii) les mélanges hydrogène-hélium restent homogènes pour la pré-compression jusqu'à 5 GPa alors qu'ils se séparent dans une cryo-cible. L'Hugoniot associé à ces états de mélange initiaux denses permet d'accéder ainsi aux conditions des intérieurs planétaires profonds. De plus, les équations de conservation de Rankine-Hugoniot peuvent être appliquées pour obtenir la pression, la densité et l'énergie des états choqués à partir des mesures de vitesse de choc. La Figure 1 résume les principaux résultats de cet effort collaboratif : le passage à l'hélium conducteur ; les données de l'équation d'état de l'hélium dense chaud, de l'hydrogène et de leurs mélanges ; la preuve d'une

séparation de phase dans les conditions intérieures de Jupiter. La faisabilité des cibles DAC a également été récemment démontrée sur l'installation NIF et des DAC chargés d'hélium à 20 GPa seront bientôt mises en service pour rechercher la transition isolant-métallique dans l'hélium dense chaud dans des conditions d'enveloppe de naines blanches.

Profitant de la capacité unique du NIF à fournir des formes d'impulsions laser précisément adaptées, l'équipe a réussi à démontrer la compression par réverbération de choc au sein des fluides cryogéniques d'hydrogène et de deutérium atteignant plus de 800 GPa (8 millions d'atmosphères) tout en maintenant la température aux environs de 1000-2000 K. Comme le montre la Figure 2, l'analyse des données VISAR a révélé avec beaucoup de détails comment les deux isotopes différents de l'hydrogène se transforment d'abord en un fluide opaque avant de devenir un métal brillant à haute pression. Cette étude détaillée fournit des repères essentiels pour la théorie avancée et la simulation informatique des matériaux quantiques tels que la théorie fonctionnelle de la densité et les techniques quantiques de Monte-Carlo. L'équipe prépare actuellement une autre publication pour décrire des expériences supplémentaires sur l'hydrogène, révélant ainsi comment la dynamique quantique des noyaux d'hydrogène affecte la transition isolant-métal dans le fluide [Lou04, Egg08, Cel10, Lou12, Bry15, Bry21].

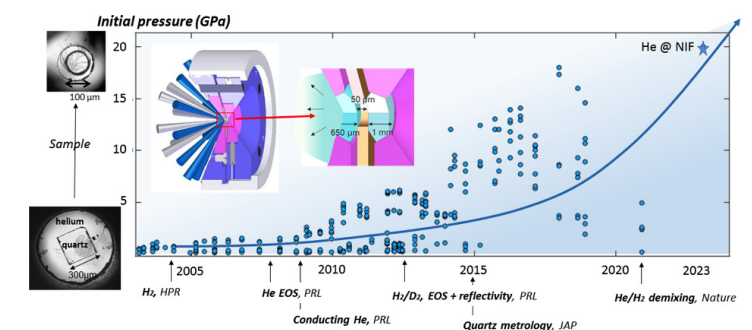


Figure 2
Design conceptuel et évolution des performances des cibles DAC au cours de la collaboration. La pression initiale n'a cessé d'augmenter, atteignant maintenant 20 GPa pour une expérience NIF prévue. La ligne donne une tendance de la pré-compression moyenne qui est mise en œuvre pour progresser dans la compréhension de l'hydrogène dense chaud et de l'hélium.

Conceptual design and evolution of the performance of DAC targets during the collaboration. The initial pressure has been steadily increasing, now reaching 20 GPa for a planned NIF experiment. The line gives a trend of the average pre-compression, which is implemented to progress in the understanding of warm dense hydrogen and helium.

CEA-DAM Île-de-France M. Dupuis, S. Péru

Lawrence Livermore National Laboratory J. E. Escher, W. Younes, E. Chimanski

The goal of the project is to develop a microscopic description of direct inelastic scattering processes by incorporating state-of-the-art nuclear structure theory into modern reaction theory. This subject has been in the center of many developments at CEA and LLNL since the early 2000s [Du06, Du08, Du11, No11, Du15, Du17a, Du19, Sa20]. The various aspects and degrees of maturity of the modeling led the two laboratories to propose this DAM-NNSA collaboration in 2017 upon a suggestion by Eric Bauge, providing a framework to revisit approximations and engage in a comparison of codes. The successful implementation of this approach will provide us with a predictive capability for inelastic scattering calculations.

To describe the structure of ground and excited states microscopically, we employ the deformed Quasi-Particle Random Phase Approximation (QRPA), implemented in codes that use the D1-type Gogny interactions (CEA and recently at LLNL). To describe the scattering process, we develop the requisite reaction-theory formalism and computational tools to integrate the structure predictions into calculations for inelastic scattering. Specifically, we calculate transition potentials by folding an effective nucleon-nucleon interaction with the QRPA transition densities. These, in turn, are used in Distorted-Wave Born Approximation (DWBA) or coupled-channels (CC) calculations.

Nuclear structure results for Zr isotopes.

We find that QRPA reproduces energies of low-lying states in multiple Zr isotopes, both spherical and deformed, as well as the trend of charge radii for all measured Zr isotopes. An attractive feature of QRPA is that it can also describe collective excitations at tens of MeV – Figure 1 shows some examples of monopole, quadrupole, dipole and octupole transitions. The monopole splitting and its connection to the coupling with quadrupole degrees of freedom has been analyzed in

deformed nuclei (left panel), as well as the coupling between dipole and octupole modes of excitation (right panel). The Zr results are currently being prepared for publication [Ch22].

Assessing the parametrization of the Gogny interaction.

The impact of including the total Coulomb interaction in a consistent manner in our HFB+QRPA calculations has been studied for Zr and Mo isotopes [Ch22, In22]. Interesting features related to vanishing proton pairing correlations suggest that the current parametrization of the Gogny interaction needs to be revisited or/and an improved treatment of the particle number is required.

Nuclear reaction predictions for proton and neutron and light ions scattering.

The CEA implementation of the integrated structure-and-reaction framework demonstrated recently the importance to include rearrangement corrections (dynamical corrections) in inelastic scattering calculations for both spherical and axially deformed targets [Du19]. A consistent description of elastic and direct inelastic observables was achieved showing the predictive power of the approach. As two important recent achievements, one cites the description of the high energy neutron emission cross section for actinides without the use of hypothetical collective levels [Du17] and the determination of the spin distributions needed to accurately determine cross sections for $^{239}\text{Pu}(n,f)$ and (n,g) reactions from surrogate reaction data [Sa20]. The agreement found with direct measurements encourages future applications of the surrogate method.

The interaction has allowed the researchers involved to broaden the scope of applications at their respective home institutions and to train several early career researchers in nuclear structure and reaction theory.

L'objectif du projet est d'aboutir à une description microscopique du processus de diffusion inélastique directe en incorporant une description de la structure nucléaire à la pointe. Cette thématique est au centre de nombreux développements au CEA et au LLNL depuis le début des années 2000 [Du06, Du08, Du11, No11, Du15, Du17a, Du19, Sa20]. Les différents aspects et degrés de maturité de la modélisation ont conduit les deux laboratoires à proposer cette collaboration DAM-NNSA en 2017, sur une suggestion d'Eric Bauge, offrant un cadre pour revisiter les approximations et engager une comparaison de codes. La mise en œuvre de cette approche couplant modèles de réaction et de structure fournira une capacité prédictive pour les calculs de diffusion inélastique.

Pour décrire microscopiquement la structure des états fondamentaux et excités, nous utilisons l'approximation QRPA (Quasiparticule Random Phase Approximation) déformée, utilisant les interactions de Gogny de type D1 (au CEA et récemment au LLNL). Pour décrire le processus de diffusion, le formalisme de réactions et les outils informatiques nécessaires sont développés de sorte à intégrer les prédictions de structure dans les calculs de diffusion inélastique. Plus précisément, les potentiels de transition sont calculés en convoluant une interaction effective nucléon-nucléon avec les densités de transition QRPA. Ces derniers sont alors intégrés dans des calculs utilisant l'approximation « Distorted Wave Born Approximation » (DWBA) ou de canaux couplés (CC).

Résultats de structure nucléaire pour les isotopes de Zr.

Nous avons obtenus que les énergies QRPA des états de basse énergie sont correctement reproduits dans de nombreux isotopes du Zr, à la fois sphériques et déformés, ainsi que la tendance des rayons de charge pour tous les isotopes du Zr mesurés. Une caractéristique intéressante de la QRPA est sa capacité à décrire également les excitations collectives à des dizaines de MeV - La Figure 1 montre quelques exemples de transitions monopolaire, quadripolaire, dipolaire et octupolaire. La séparation de la

monopôle et son couplage aux degrés de liberté quadripolaires ont été analysés dans des noyaux déformés (panneau de gauche), ainsi que le couplage entre les modes d'excitation dipolaire et octupolaire (panneau de droite). Un article sur les résultats obtenus dans les Zr est en cours de préparation [Ch22].

Évaluation de la paramétrisation de l'interaction de Gogny.

L'impact de l'inclusion cohérente de l'interaction coulombienne complète dans nos calculs HFB+QRPA a été étudié pour les isotopes Zr et Mo [Ch22, In22]. Des effets intéressants liés à la disparition de l'appariement proton suggèrent que la paramétrisation utilisée de l'interaction de Gogny doit être revisitée et/ou qu'un traitement amélioré du nombre de particules est nécessaire.

Prédictions des réactions nucléaires pour la diffusion de protons, de neutrons et d'ions légers.

Les études récentes menées au CEA ont démontré l'importance d'inclure des corrections de réarrangement (corrections dynamiques) dans les calculs de diffusion inélastique pour les cibles sphériques et axialement déformées [Du19]. Une description cohérente des observables élastiques et inélastiques directes a été réalisée, montrant le pouvoir prédictif de l'approche. Parmi deux réalisations récentes importantes, citons la description de la section efficace d'émission de neutrons à haute énergie pour les actinides sans l'utilisation de niveaux collectifs fictifs [Du17] et la détermination des distributions de spin nécessaires pour reproduire avec précision les sections efficaces $^{239}\text{Pu}(n,f)$ et (n,g) à partir des données de réaction de substitution [Sa20]. L'accord trouvé avec les mesures directes est encourageant pour de futures applications de la méthode de substitution.

Ce cadre collaboratif a permis aux chercheurs impliqués d'élargir leur domaine d'application dans leurs laboratoires respectifs et de former plusieurs chercheurs en début de carrière à la structure nucléaire et à la théorie des réactions.

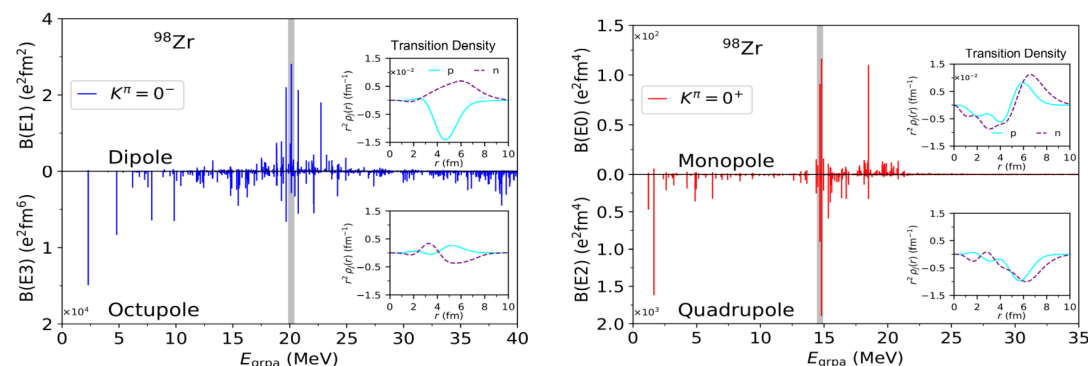


Figure 1

Predicted transition densities for ^{98}Zr . Left panel: coupling between the monopole and quadrupole excitations; right panel: dipole-octupole coupling. Insets: radial behavior of the transition densities.

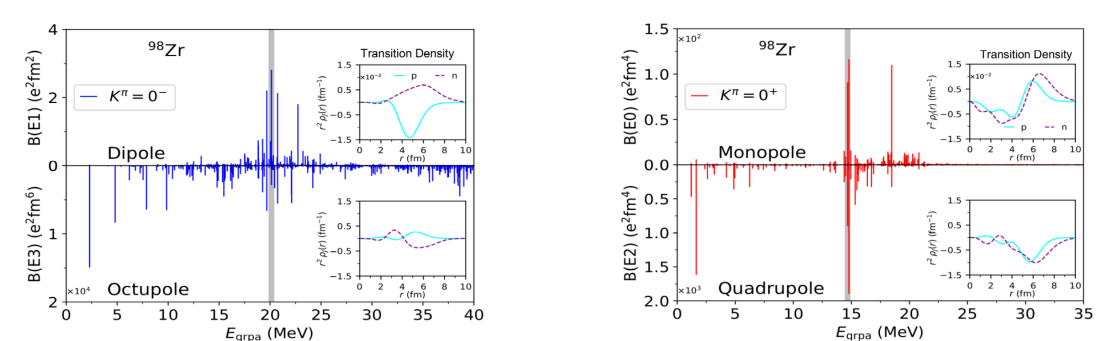


Figure 1

Densités de transition prévues pour le ^{98}Zr . Panneau de gauche : couplage entre les excitations monopôle et quadripôle ; panneau de droite : couplage dipôle-octupôle. Encarts : comportement radial des densités de transition.

CEA-DAM: Cesta, Île-de-France

Sandia National Laboratory

The propagation of relativistic electron beams gave rise to numerous studies throughout the world several decades ago. The objective of the current program is to improve, using both modern diagnostics and modern simulation tools, the understanding of the phenomena involved during the transport, in a low pressure gas (0.1-10 mbar), of pulsed electron beams (10-100 ns), with energy > 100 keV and current > 1 kA. These conditions are reached in high power pulsed facilities such as SATURN, HERMES and SPHINX at SNL and CESAR and RKA at CEA/CESTA. The goal of our collaboration is to conduct fundamental beam transport experiments to gather data in order to validate the numerical tools that will help us optimize complex experiments.

The lower the energy and the stronger the current of an electron beam, the less it will be able to propagate in vacuum due to the effect of its own electric and magnetic fields. However, when an electron beam propagates in a gas, it is capable of ionizing neutral atoms and/or molecules. The resulting positive charges both screen the longitudinal electric field which tends to repel the electrons towards their site of emission and the radial electric field which tends to defocus the beam. Moreover, if the current is strong enough, the secondary electrons moving in the plasma produce a current in the direction opposite to the beam leading to a total current cancellation. This plasma current prevents beam focusing which would have appeared due to the self azimuthal magnetic field existing at high currents. Therefore, under certain gas conditions, the transport of intense electron beams over significant distances becomes possible.

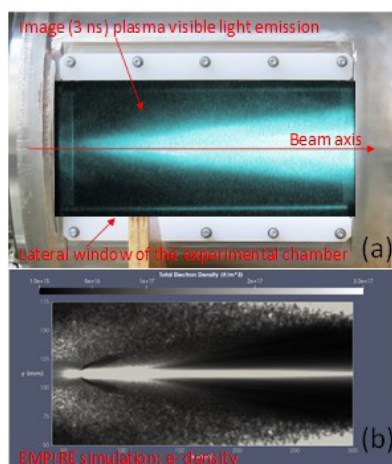


Figure 1
RKA beam propagation in a 0.1 mbar Ar chamber: a) captured visible light b) EMPIRE simulation of the electron density.

Propagation du faisceau du RKA dans une chambre remplie d'Ar à 0.1 mbar: a) image de la lumière visible émise, b) simulation EMPIRE de la densité électronique.

J. Gardelle, D. Hebert, N. Szalek, P. Grua, X. Davoine, L. Gremillet
C. H. Moore, B. M. Medina, K. L. Cartwright, I. Owens, E. L. Rhoades

The interaction between an electron beam and a gas, initially neutral, is particularly difficult to simulate because the plasma produced by the beam is not purely thermal. The physics involved in beam-gas coupling is both in a kinetic and fluid regime. On the one hand, *particle-in-cell* (PIC) codes have difficulties computationally handling the large number of secondary particles coming from the collisions and, on the other hand, purely collisional fluid codes do not reproduce the involved physics. We must therefore develop hybrid PIC/fluid collisional models.

The main objective of SNL is to validate the EMPIRE plasma code. This is a 2D/3D finite element hybrid PIC-Monte Carlo/Fluid plasma code which is written in C++ and is being developed to be used on the most modern architectures. EMPIRE is being validated by comparing its predictions both with those from other codes and with experimental data. More precisely, we are using results from repeatable and well instrumented experiments (RKA and SPHINX), as well as predictions from the GAZEL and CALDER codes developed at CEA for simplified geometries, with beam currents and gas pressures that allow for interesting transport dynamics to develop while being low enough that the number of particles to manage (and thus simulation time) are reasonable.

The objective of CESTA is to optimize the experiments performed on CESAR by controlling the fluence and the spatial beam homogeneity at the position of the target which is made of the material to be studied. Because the CESAR diode produces a 300 kA beam, we need to use a strong external magnetic field in order to properly extract the beam from the diode and to focus the electrons onto the target. Today, we cannot simulate correctly nor optimize the experiments performed with this generator. Consequently, the support of simulations is mandatory to control with confidence the electron beam in the experiments carried out on CESAR.

Experiments with the RKA generator at CESTA have started. They will be followed by equivalent experiments with the SPHINX generator at SNL. We present in Figure 1 a) an image of the visible light emitted by the plasma during the passage of the RKA beam through the argon-filled experimental chamber. An EMPIRE simulation of the electron plasma density produced during the passage of the beam is displayed in Figure 1 b). This first simulation was performed after extensive comparison between EMPIRE, GAZEL and CALDER that allowed us to fix several bugs. GAZEL is a hybrid 2D code that describes the beam by the PIC method while the plasma species are modeled by fluids. The 2D/3D code CALDER, initially developed at DIF to simulate laser-plasma interactions, now allows us to simulate electron beam propagation. An example of comparison between EMPIRE and GAZEL is displayed in Figure 2 for a 500 keV beam propagating in a 2D plane geometry at 0.1 mbar. We observe similar beam behaviors for these two simulations.

J. Gardelle, D. Hebert, N. Szalek, P. Grua, X. Davoine, L. Gremillet
C. H. Moore, B. M. Medina, K. L. Cartwright, I. Owens, E. L. Rhoades

L'objectif du programme en cours est d'améliorer, en utilisant à la fois les diagnostics et les outils de simulation modernes, la compréhension des phénomènes mis en jeu lors du transport dans un gaz à basse pression (0.1-10 mbar) de faisceaux d'électrons pulsés (10-100 ns), d'énergie > 100 keV et de courant > 1 kA. Ces conditions sont atteintes dans des installations de hautes puissances pulsées telles que SATURN, HERMES et SPHINX au SNL ainsi que CESAR et RKA au CEA/CESTA. Le but de notre collaboration est de conduire des expériences fondamentales de transport de faisceau pour obtenir des données permettant de valider les outils numériques qui nous aideront à optimiser des expériences plus complexes.

Plus l'énergie d'un faisceau d'électrons est faible, et plus son courant est fort, moins il peut se propager dans le vide en raison de l'effet de ses propres champs électrique et magnétique. Cependant, lorsqu'un faisceau d'électrons se propage dans un gaz, les mécanismes d'ionisation libèrent des charges positives qui écrantent et minimisent l'effet des champs sus-nommés. En outre, si le courant est assez fort, les électrons secondaires du plasma créent un courant de sens opposé à celui du faisceau jusqu'à annuler le courant total, permettant ainsi de compenser la focalisation du faisceau dû à son propre champ magnétique azimuthal. Ainsi, sous certaines conditions, un faisceau d'électrons intense peut être transporté sur des distances significatives.

L'interaction entre le faisceau et le gaz, initialement neutre, est particulièrement difficile à simuler car le plasma produit par le faisceau n'est pas purement collisionnel. La physique mise en jeu dans le couplage faisceau gaz est dans un régime à la fois cinétique et fluide. Les codes Particle-in-cell (PIC) peinent à gérer le grand nombre de particules secondaires issues des collisions et les codes fluides, purement collisionnels, ne restituent pas la physique mise en jeu. Il est donc nécessaire de développer des modèles hybrides PIC/fluide collisionnels.

L'objectif principal du SNL est de valider EMPIRE, un code plasma PIC-Monte Carlo/fluide, 2D/3D, à éléments finis. Il est écrit en C++ et développé pour être utilisé sur les architectures les plus modernes. Il doit par conséquent être validé en comparant ses résultats à ceux issus d'autres codes ou à ceux provenant d'expérimentations. En pratique, dans le cadre de cette étude, sont mis à profit, d'une part, les résultats provenant d'expériences répétables et bien instrumentées et, d'autre part, des comparaisons avec les codes GAZEL et CALDER du CEA pour des géométries simplifiées et pour des courants de faisceau et des pressions de gaz pas trop élevés. Dans ce cas, le nombre de particules à gérer et le temps de simulation restent raisonnables.

L'objectif du CESTA est d'optimiser les expériences effectuées sur CESAR en contrôlant la fluence et l'homogénéité du faisceau quand il impacte la cible constituée du matériau à étudier. L'appui des simulations est fondamental pour avoir une parfaite maîtrise

CEA-DAM: Cesta, Île-de-France

Sandia National Laboratory

des expériences effectuées sur CESAR où l'emploi d'un fort champ magnétique externe est nécessaire pour extraire et focaliser le faisceau de 300kA.

Des expériences ont démarré avec le RKA qui seront suivies d'expériences équivalentes avec le générateur SPHINX du SNL. Nous présentons sur la Figure 1 un exemple d'image de la désexcitation du plasma lors du passage du faisceau du RKA à travers la chambre d'expérience remplie d'argon et une première simulation EMPIRE de la densité des électrons du plasma produit lors du passage du faisceau. Cette première simulation a été accomplie après avoir comparé les résultats d'EMPIRE avec les codes GAZEL et CALDER qui ont permis de résoudre divers problèmes numériques. GAZEL est un code 2D hybride qui décrit le faisceau par la méthode PIC tandis que les espèces plasmas sont modélisées par des fluides. Le code 2D/3D CALDER, initialement développé à la DIF pour simuler les interactions laser-plasma, permet aujourd'hui d'y inclure un faisceau d'électrons. Un exemple de comparaison entre EMPIRE et GAZEL est donné sur la Figure 2 pour un faisceau de 500 keV se propageant dans une géométrie 2D plan à 0.1 mbar. Des comportements similaires du faisceau sont observés pour ces deux simulations réalisées à un instant de fonctionnement donné.

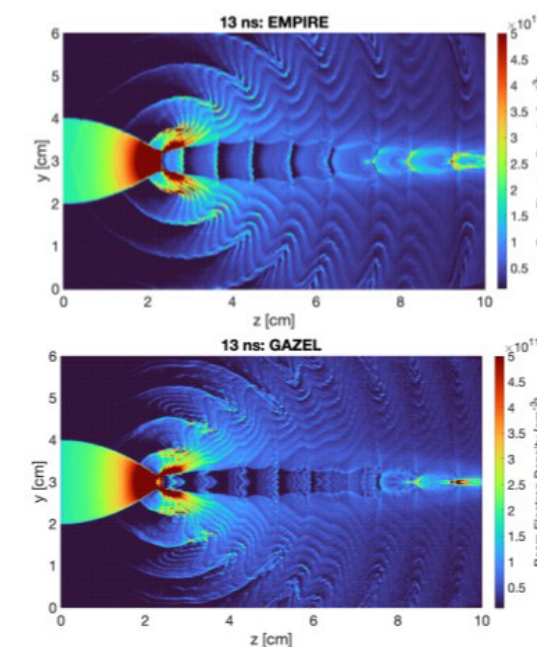


Figure 2
Simulation de la propagation du faisceau du RKA dans une chambre 2D remplie d'Ar à 0.1 mbar: densité électronique à 13 ns obtenues par les codes EMPIRE et GAZEL.

Simulation of the RKA beam propagation through a chamber filled with Ar at 0.1 mbar: beam density at 13 ns as calculated by EMPIRE and GAZEL.

CEA-DAM: Valduc, Gramat

Sandia National Laboratory

C. Chauvin, D. Palma de Barros, C. Voltz

J.-P. Davis, J. L. Brown, T. Ao, M. D. Knudson, D. H. Dolan

The behavior of metals undergoing polymorphic (structural) phase transformations in dynamic high-pressure conditions is directly relevant to the stockpile stewardship missions of both NNSA and CEA. Of particular high interest, both scientific and programmatic, is a deeper understanding of phase-transformation kinetics; our goal is ultimately to improve the accuracy of the labs' hydrocode simulations that rely on multiphase equations of state (EOS).

Tin (Sn) is a candidate for these studies, it possesses a low melt temperature and a phase transition between the β and γ structures at 9.4 GPa on the room-temperature isotherm. The β - γ phase boundary in the temperature-pressure plane has been investigated under both static and dynamic compressions, showing significant discrepancies in phase-boundary position due presumably to time-dependent effects, *i.e.*, kinetics. Current models do not accurately reproduce dynamic-compression experiments, there is an essential need to gain deeper insight into the effects of loading time on the Sn phase diagram.

SNL and CEA-Gramat have each developed an experimental technique for ramped dynamic compression through magnetic loading by high pulsed-power (HPP) machines. Often referred to as isentropic compression experiments (ICE), this approach loads material samples to thermodynamic states along a quasi-isentrope. This is complementary to the higher-temperature compression states on the shock Hugoniot obtained by traditional impact techniques (gas/powder driven gun). ICE typically measures sound speed in a continuous propagating stress wave, which can be far more sensitive to phase-transition kinetics than a discontinuous shock wave.

Figure 1 shows the three HPP facilities used by our collaboration. Thor at SNL has controllable pulse shape in the range of 200-500 ns rise time with a peak current of up to 2.5 MA (less at longer rise time). At CEA Gramat, the older GEPI machine (built in the late 1990s) delivers a peak current up to 3.3 MA with a 500-ns rise time, while the newer ICE16 machine delivers a peak current up to 5 MA with a 1- μ s rise time. In Figure 2, the target configuration for ICE is similar at all three machines, consisting of two parallel, rectangular plate electrodes shorted at one end, referred to as

a stripline, with samples mounted on one or both plates; during the experimental time of interest, the central part of each sample is compressed under uni-axial deformation. Magnitude of the ramped magnetic pressure applied to the electrodes and transmitted into the sample is controlled by the stripline width and the amount of electrical current delivered to the stripline.

Similar experiments on tin have already been performed at both CEA Gramat and SNL to quasi-isentropically compress across the β - γ transition, with single-crystal samples (of various orientations in the direction of wave propagation), commercially available polycrystalline samples, and fine-grained polycrystalline samples. Figure 3a compares a few of the measured velocity waveforms. These show a clear influence of crystal orientation on phase-transition stress. To better quantify the effects of loading rate on the phase transition under ramp loading, we are collaboratively planning experiments at all three HPP machines that are carefully designed to apply the same magnitude of pressure loading on the same materials, but at a range of loading rates. Figure 3b shows examples of the expected difference in loading rates.

Velocimetry data can determine the pressures at which structural phase transitions occur and constrain their kinetics, but do not provide any direct evidence of a transformation's progress or the mechanisms by which atomic structure is rearranged. Dynamic X-ray diffraction (DXRD) of samples undergoing shock or ramp compression, can address this. Though challenging to implement, we have each successfully fielded DXRD in similar reflection-geometry configurations, using different pulsed X-ray sources at CEA Gramat's Pyrène gas gun and at SNL's Thor machine. Only the CEA DXRD experiments have thus far focused on Sn, but we have begun to collaboratively define complementary DXRD experiments on Sn at Thor. CEA Gramat was awarded experiments on Sn at Argonne National Laboratory's Advanced Photon Source (APS) in the Dynamic Compression Sector (DCS); and SNL provided advice on experimental details based on their experience with similar work at DCS.

Another limitation of velocimetry data is it relates only to mechanical response, while phase boundaries in the EOS of Sn also depend strongly on thermal response. We have worked on measuring temperature under dynamic loading by optical/infrared pyrometry and on pre-heating samples for ICE; areas of potential collaboration. An important issue for experiments on polycrystalline Sn is that commercial high-purity material has grains that are large relative to the sample size, such that velocity measured at a point does not represent the bulk polycrystalline response needed for EOS models in hydrocodes. Stable fine-grained Sn is difficult to produce. We obtained material of average grain size under 50 μ m, both within this collaboration from CEA Valduc and through other SNL projects from Los Alamos National Laboratory (LANL). We plan to compare the two fine-grained materials under dynamic compression, as well as test grain size stability with temperature for possible use in pre-heated ICE.

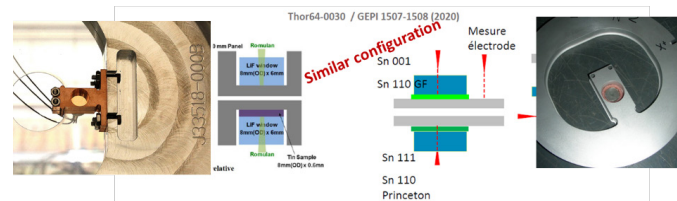


Figure 1.
Photos and cross-sectional schematics of ICE target configurations at Thor (left) and GEPI (right).

Photographies et schémas des configurations expérimentales sur Thor (à gauche) et sur GEPI (à droite).

C. Chauvin, D. Palma de Barros, C. Voltz

J.-P. Davis, J. L. Brown, T. Ao, M. D. Knudson, D. H. Dolan

Le comportement des métaux subissant un changement de phases polymorphiques sous haute pression dynamique des matériaux est un thème fondamental pour les programmes simulation de la NNSA et du CEA. En particulier, une meilleure compréhension des cinétiques liées à ces changements de phase est d'un fort intérêt aussi bien pour les programmes que pour répondre à un enjeu scientifique : l'objectif à terme étant d'améliorer notre capacité de les reproduire avec une précision satisfaisante sous chargement dynamique à hautes pressions inclus dans nos Equations d'état (EOS) multiphasés utilisées dans les codes de calculs hydrodynamiques.

L'étain (Sn) est un bon modèle pour ces études puisqu'il possède un bas point de fusion et présente un changement de phase d'une structure solide β vers une autre phase solide γ se produisant à une pression relativement basse (9.4 GPa à 300 K). Celle-ci a d'ailleurs été déjà largement étudiée à l'aide de techniques expérimentales variées dans le domaine statique et dynamique mettant en évidence des différences de positions des frontières et révélant un effet lié au temps d'application du chargement, un aspect cinétique. Il est à ce stade fondamental de mieux apprendre à connaître son diagramme de phase suivant les temps d'impulsion du chargement.

La SNL et le CEA Gramat ont développé une technique expérimentale appliquant une rampe de compression dynamique sur l'échantillon. Un chargement magnétique liée à l'utilisation de générateurs électriques de haute puissance pulsée (HPP) est appliqué sur deux électrodes plates montées en parallèle en court-circuit à leur extrémité. L'amplitude de la pression sur l'échantillon dépend de la largeur de l'électrode et de l'amplitude du courant délivré. Le générateur Thor à la SNL délivre un courant jusqu'à 2.5MA sur une durée de 200 ns à 500 ns, le générateur GEPI du CEA, 3.3 MA en 500 ns et le nouveau générateur ICE16, 5 MA en 1 μ s. Les configurations expérimentales sont directement comparables (Figure 1).

Appelée expérience de compression isentropique (ICE), cette approche permet d'atteindre d'autres états thermodynamiques hors choc le long d'une quasi-isentrope, états complémentaires à ceux traditionnellement obtenus par choc le long de l'Hugoniot avec lanceur.

Des expériences sur étain avaient été auparavant réalisées dans les deux laboratoires pour observer la transition β - γ avec des échantillons de nature différente : monocristaux (de différentes orientations par rapport à la propagation de l'onde mécanique), polycristaux issus du commerce et à grains fins. La Figure 2a compare des mesures de vitesse et met clairement l'orientation cristalline sur la transition. Les effets de la vitesse de déformation sur le changement de phase en compression isentropique sont étudiés grâce à un plan d'expériences sur les 3 moyens. L'objectif est à chaque fois

CEA-DAM: Valduc, Gramat

Sandia National Laboratory

d'appliquer la même amplitude de pression de chargement sur l'étain mais avec des temps d'impulsion différents. La Figure 2b montre des exemples des différences attendues dans les taux de compression.

Côté diagnostic, la pression à laquelle a lieu le changement de phase est déduite des mesures de vitesse, mesures néanmoins insuffisantes pour connaître l'avancée ou le mécanisme de réarrangement cristallin de la transition. La diffraction X sous sollicitation dynamique (DXRD) est une solution pour y accéder. Son implémentation est un challenge, mais le CEA et la SNL ont mis au point une technique similaire reposant sur une géométrie en réflexion utilisant différents types de source X sur leurs moyens respectifs définissant des expériences complémentaires sur lanceur et sur ICE et en parallèle, sur grandes installations au secteur de compression dynamique (DCS) à l'Advanced Photon Source (APS) de l'Argonne National Laboratory (ANL). Le CEA et la SNL ont travaillé sur la mise au point de techniques de mesure de température par pyrométrie optique infrarouge et de préchauffage d'échantillons pour évaluer et mettre en commun la réponse thermique de l'étain.

Une autre difficulté est de disposer un matériau à grains fins car l'étain a une propension à former de gros grains (de l'ordre du mm) et cela limite les mesures précises pour les expériences dynamiques. Les récents procédés du CEA Valduc et du Los Alamos National Laboratory (LANL) permettent d'avoir des tailles de grains de l'ordre de 50 μ m. Des expériences de comparaison sont prévues sous compression isentropique sur cibles polycristallines (voire préchauffées).

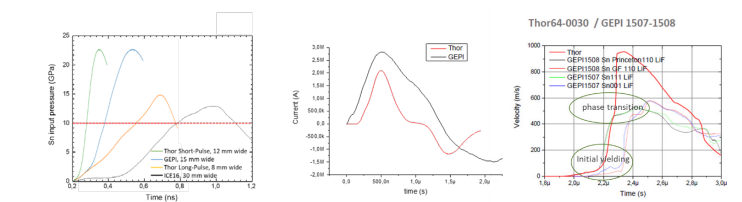


Figure 2
(a) Profil de pression suivant certaines largeurs d'électrode à l'interface Al/Sn pour GEPI (en bleu), ICE16 (en noir) et Thor au temps le plus court (en vert) et le plus long (orange); la ligne noire en pointillé représente approximativement la pression de transition de l'étain de β à γ . (b) Profils de vitesse expérimentale à l'interface Sn/LiF: le précurseur élastique et la transition de phase sont influencés suivant l'orientation cristalline initiale.

Figure 2. (a) approximate ramped pressure history at the Al-Sn interface for GEPI (blue), ICE16 (black), and Thor at its shortest (green) and longest (orange) pulse rise times, with the indicated stripline widths; the horizontal dashed line marks approximately where the Sn transforms from β to γ . (b) Velocity waveforms measured at the Sn-LiF interface show strong effects of crystal orientation on the character of elastic-plastic yielding and of the β - γ phase transition.

CEA-DAM Île de France

P. Morfouace, G. Belier, J. Taïeb, A. Chatillon, B. Mauss

Los Alamos National Laboratory

Lawrence Livermore National Laboratory

T. A. Bredeweg, M. E. Gooden, P. Talou, T. Kawano, A. Lovell

A. Tonchev, J. Silano, A. Ramirez, R. Malone, N. Schunck, M. Verrière

The P205 project of the DAM/NNSA collaboration aims at performing high precision measurements of fission product yields for actinides of particular importance. A review of the fission bases used by the U.S. national labs was conducted in 2010, with expert participation from CEA-DAM. The report from that review pointed to disagreement between several experiments performed on ²³⁵U, ²³⁸U, and ²³⁹Pu that are central to determining the number of fissions that has occurred in a sample. This project is aimed at resolving these discrepancies by pulling together work that has occurred through mixed collaborations at Los Alamos National Laboratory (LANL), Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) and CEA over the past decade. During that time, new integral experiments were performed at Valduc with the CALIBAN reactor using new fission chambers followed with experiment at the ORPHEE reactor at Saclay to extract the fission chamber detection efficiency to determine the final yield numbers. In parallel LANL and LLNL, in collaboration with researchers at Duke University, have focused on a new set of measurements performed at the Triangle Universities Nuclear Laboratory to probe the energy dependence of certain fission product yields (Figure 1). LANL has also performed integral fission product yield measurements at the National Criticality Experiments Research Center at the Nevada National Security

Site (Figure 2), in the same spirit as the experiments performed at CALIBAN. These efforts are still being pursued.

In more recent years, CEA has started a new experimental program at the Grand Accélérateur National d'Ions Lourds at Caen, to measure isotopic fission-fragments yields as a function of the excitation energy of the fissioning system with high precision and statistics. This program benefits from the high beam intensity of ²³⁸U to produce fissioning systems of interest by inverse-kinematics transfer reaction coupled with the VAMOS spectrometer and the newly designed highly segmented silicon array.

Lawrence Livermore National Laboratory has also initiated a new collaboration to measure fission fragments yields from photofission using the unique capability of the High-Intensity Gamma-Ray Source (HIGS) facility at the Triangle Universities Nuclear Laboratory. The measurements at HIGS will establish the first benchmark of direct and inverse-kinematic results for the same fission observables.

The different experimental approaches aim to reach a common goal: provide high precision fission fragment yields of important nuclei. The understanding of the fission yields will benefit from the large variety of probes used by the different experimental campaigns.

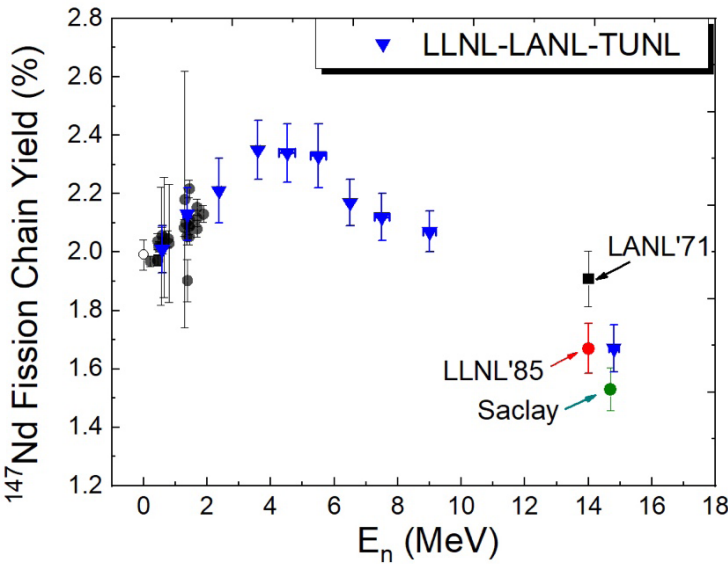


Figure 1.
Energy dependence of the ¹⁴⁷Nd yield from fission of ²³⁹Pu by mono-energetic neutrons.
Dépendance énergétique du rendement en ¹⁴⁷Nd de la fission du ²³⁹Pu par des neutrons mono-énergétiques.

P. Morfouace, G. Belier, J. Taïeb, A. Chatillon, B. Mauss

T. A. Bredeweg, M. E. Gooden, P. Talou, T. Kawano, A. Lovell

A. Tonchev, J. Silano, A. Ramirez, R. Malone, N. Schunck, M. Verrière

Le projet P205 de la collaboration DAM/NNSA vise à effectuer des mesures de haute précision sur les rendements des produits de fission pour les actinides d'importance. Une revue des bases de données utilisées par les laboratoires nationaux américains a été réalisée en 2010, avec la participation d'experts du CEA-DAM. Cet examen a souligné un désaccord entre plusieurs expériences réalisées sur l'²³⁵U, l'²³⁸U et le ²³⁹Pu qui sont essentielles pour déterminer le nombre de fissions qui se sont produites dans un échantillon. Ce projet vise à résoudre ces divergences en rassemblant les travaux qui ont eu lieu au cours de la dernière décennie grâce à des collaborations entre le Los Alamos National Laboratory (LANL), le Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL) et le CEA-DAM. Durant cette période, Le CEA-DAM a réalisé de nouvelles expériences intégrales à Valduc auprès du réacteur CALIBAN, utilisant de nouvelles chambres à fission, suivies d'expériences sur le réacteur ORPHEE à Saclay pour extraire l'efficacité de détection de ces chambres et déterminer les rendements finaux. En parallèle, le LANL et le LLNL, en collaboration avec des chercheurs de l'Université Duke, se sont concentrés sur un nouvel ensemble de mesures effectuées au Triangle Universities Nuclear Laboratory (TUNL) pour sonder la dépendance énergétique de certains rendements de produits de fission (Figure 1). Le LANL a également réalisé des mesures intégrales de rendement des produits de fission au National Criticality Experiments Research Center du Nevada National Security Site (Figure 2), dans le même esprit que les expériences réalisées à CALIBAN. Ces efforts sont toujours poursuivis.

Très récemment, le CEA-DAM a initié un nouveau programme expérimental au Grand Accélérateur National d'Ions Lourds (GANIL), à Caen, afin de mesurer les rendements de fragments de fission isotopiques en fonction de l'énergie d'excitation du système fissionnant avec une précision et une statistique élevée via une technique expérimentale originale.

CEA-DAM Île de France

Los Alamos National Laboratory

Lawrence Livermore National Laboratory

Ce programme bénéficie de l'intensité élevée du faisceau d'²³⁸U du GANIL pour produire le système fissionnant d'intérêt par réaction de transfert en cinématique inverse. Le couplage au spectromètre VAMOS (collaboration avec le CEA-DRF) et au nouvel ensemble de détecteurs de silicium hautement segmenté fourniront des données particulièrement précises et indépendantes des mesures antérieures.

Le Lawrence Livermore National Laboratory a également lancé une nouvelle collaboration pour mesurer les rendements de fragments de fission issus de la photofission en utilisant la capacité unique de l'installation de source de rayons gamma à haute intensité (HIGS) au Triangle Universities Nuclear Laboratory. Les mesures à HIGS établiront de premières comparaisons entre les résultats en cinématiques directs et inverses pour les mêmes observables de fission.

Les différentes approches expérimentales visent à atteindre un objectif commun : mesurer avec une grande précision les rendements de fragments de fission de noyaux importants. La connaissance des rendements de fission bénéficiera de la grande variété d'approches utilisées par les différents programmes expérimentaux.

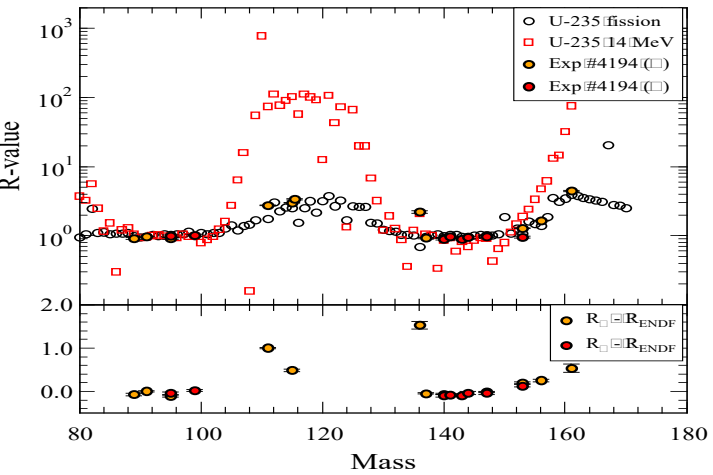


Figure 2.
Rendements relatifs de produits de fission intégraux mesurés pour l'²³⁵U irradié sur l'assemblage critique Flatop-HEU (Exp #4194) par rapport aux rendements ENDF/B-VII.1 pour la fission de ²³⁵U à partir de neutrons de 500 keV ("fission") et de 14 MeV. Le panneau inférieur montre la différence entre la "fission" mesurée et ENDF.
Measured relative integral fission product yields for ²³⁵U irradiated on the Flatop-HEU critical assembly (Exp #4194) compared to ENDF/B-VII.1 yields for fission of ²³⁵U from 500 keV ("fission") and 14 MeV neutrons. Lower panel shows difference between measured and ENDF "fission".

TIME DEPENDENT STUDY OF MATERIALS UNDER DYNAMIC COMPRESSION IN A DIAMOND ANVIL CELL

CEA-DAM Île de France

C. Pépin, F. Occelli, R. André, P. Loubeyre

Lawrence Livermore National Laboratory

Z. Jenei, E. F. O'Bannon, D. T. Sneed, W. J. Evans

The behavior of materials under extreme conditions of high pressure and temperature can be accessed by either static compression (diamond anvil cell (DAC)) or dynamic compression (gas gun, laser) methods. The time scales of gas gun and laser dynamic compression range from microsecond to nanoseconds. Such fast compressions can produce differences from static properties such as deviations from the equilibrium phase diagram, the formation of metastable phases or different crystal growth morphology. To gain a better understanding of the dynamic behavior of materials at intermediate compression rates between static and dynamic approaches, a new device called dynamic-DAC or dDAC, consisting of the adjunction of a piezoelectrical actuator to a conventional DAC, was designed in 2007 (*Figure 1, Evans07*). The focus of this collaboration is to improve the performance of the compression hardware while expanding the accessible pressure-temperature-time space and to develop and implement new microscopic diagnostics to probe materials under fast compression in the dDAC, such as time resolved x-ray diffraction, x-ray phase contrast imaging, and x-ray absorption spectroscopy. These diagnostics are being developed and implemented at 3rd and 4th generation synchrotron light sources, as well as x-ray free electron lasers.

The initial implementation of the dDAC only allowed reaching compression rates in the order of a few GPa/s [*Evans07*], improvements of the design and technological advancements on the piezoelectric-actuator now offer the possibility to routinely work at compression rates of several tens of GPa/ms [*Jenei19*]. In parallel, the rapid improvement of 3rd and 4th

generation synchrotron to perform time-resolved experiments has made it possible implementing new x-ray diagnostic, providing valuable information at a microscopic level. The major improvement has come from the appearance of new x-ray detectors working at a ms to μ s time resolution.

Recently, the collaboration has had access to the newly opened European XFEL, performing the first μ s-time-resolved X-ray experiment in a dDAC. This proof-of-concept experiment, as described in *Figure 2*, focused on the Bi-III – Bi-V phase transition. The EuXFEL offers the unique possibility to acquire x-ray diffraction images at a frequency up to 4.5 MHz, which allows getting a “film” of the ramp compression with an image at every 100 ns. An example can be seen in *Figure 2* where the integrated images, acquired at 1.1 MHz, are stacked over time, displaying a very smooth evolution of the diffractograms over 180 μ s. Following this successful demonstration, a new proposal, specifically on the compression rate dependency of the phase transitions in Bi, has been submitted by the collaboration and has been awarded beamtime in October 2022.

The collaboration is also actively pursuing dDAC experiments at high temperature to explore a larger domain of the phase diagrams. The piezo actuator used in the dDAC is very sensitive to the temperature and will depolarize above 130°C. New innovative techniques are then being tested by both groups to try to heat the samples resistively and locally without damaging the piezo-actuator. The first results obtained are encouraging: heating for several minutes at temperatures up to 800°C was achieved. The newly developed heating technique should make it possible to explore recrystallization dynamics in certain materials at microsecond time scales. The implementation of this technique should give rise in the future to a new joint proposal at the EuXFEL. In summary, the collaboration enables a synergy to push the technique of the dDAC and assembles a task force to work in front of the XFEL.

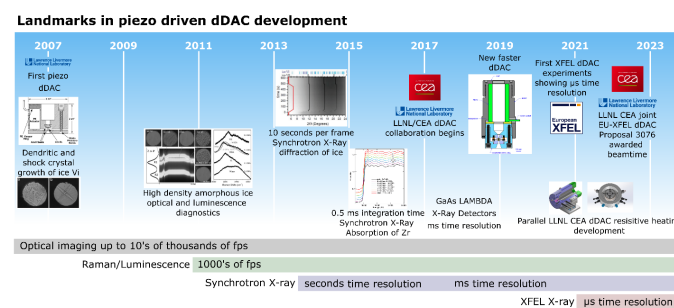


Figure 1
Landmarks in the development of a piezo-driven dynamic diamond anvil cell. The first piezo-dDAC was designed in 2007 and improved in 2019. The LLNL/CEA collaboration started in 2017 and fostered of the first μ s-time-resolved experiment using a dDAC at the EuXFEL in 2021.

Développement et améliorations successives d'une cellule dynamique à enclumes de diamant mise en condition par un actionneur piézoélectrique. La première dDAC piézoélectrique a été conçue en 2007 et améliorée en 2019. La collaboration LLNL/CEA a commencé en 2017 et a été à l'origine de la première expérience résolue en μ s utilisant une dDAC à l'EuXFEL en 2021.

ETUDE RÉSOLUE EN TEMPS DE MATÉRIAUX SOUS COMPRESSION DYNAMIQUE EN CELLULE À ENCLUMES DE DIAMANT

C. Pépin, F. Occelli, R. André, P. Loubeyre

CEA-DAM Île de France

Z. Jenei, E. F. O'Bannon, D. T. Sneed, W. J. Evans

Lawrence Livermore National Laboratory

Le comportement des matériaux dans des conditions extrêmes de pression et de température est accessible par des méthodes de compression statique (cellule à enclumes de diamant (DAC)) ou de compression dynamique (canon à gaz, laser). Les échelles de temps lors de la compression dynamique par canon à gaz ou par laser vont de la microseconde à la nanoseconde. De tels taux de compression peuvent engendrer des différences notables par rapport aux propriétés statiques, comme des écarts par rapport au diagramme de phase d'équilibre, la formation de phases métastables ou une morphologie de croissance cristalline différente. Afin de mieux comprendre le comportement dynamique des matériaux à des taux de compression intermédiaires entre les approches statique et dynamique, un nouveau dispositif appelé dynamique-DAC ou dDAC, consistant en l'adjonction d'un actionneur piézoélectrique à une DAC classique, a été conçu en 2007 (*Figure 1, Evans07*). L'objectif de cette collaboration est d'améliorer les performances des outils de compression, tout en élargissant le domaine pression-température-temps accessible, et de développer et mettre en œuvre de nouveaux diagnostics microscopiques pour sonder les matériaux sous compression dynamique en dDAC, comme la diffraction des rayons X résolue en temps, ou encore la spectroscopie d'absorption des rayons X. Ces diagnostics sont développés et mis en œuvre sur des sources synchrotron de 3^{ème} et 4^{ème} génération, ainsi que sur des lasers à électrons libres.

Alors que la première version de la dDAC ne permettait d'atteindre des taux de compression que de l'ordre de quelques GPa/s [*Evans07*], les améliorations du design et les avancées technologiques de l'actionneur piézo offrent désormais la possibilité de travailler de manière routinière à des taux de compression de plusieurs dizaines de GPa/ms [*Jenei19*]. Parallèlement à ces développements, l'évolution rapide des synchrotrons de 3^{ème} et 4^{ème} génération pour réaliser des expériences résolues en temps a permis la mise en œuvre de nouveaux diagnostics X, fournissant des informations précieuses au niveau microscopique. L'amélioration majeure est notamment venue de l'apparition de nouveaux détecteurs de rayons X fonctionnant à une résolution temporelle de la ms à la μ s.

Récemment, la collaboration a eu accès au XFEL européen nouvellement ouvert, réalisant la première expérience de diffraction des rayons X résolue en temps à la μ s dans une dDAC. Cette expérience de démonstration de concept, telle que décrite dans la *Figure 2*, s'est concentrée sur la transition de phase Bi-III – Bi-V. L'EuXFEL offre la possibilité unique d'acquérir des images de diffraction des rayons X à une fréquence allant jusqu'à 4.5 MHz, permettant d'obtenir un « film » de la rampe de compression avec une image toutes les 100 ns. Un exemple est donné en *Figure 2* où les images intégrées, acquises à 1,1 MHz, sont empilées dans le temps, affichant une évolution quasi-continue des diffractogrammes sur 180 μ s. Suite à cette démonstration réussie,

un nouveau projet s'intéressant spécifiquement à la dépendance au taux de compression des transitions de phase dans le Bi a été soumis par la collaboration. Celui-ci a été accepté et aura lieu en octobre 2022.

La collaboration développe également la mise en œuvre d'expériences dDAC à haute température afin d'explorer un domaine plus étendu des diagrammes de phase. L'actionneur piézo utilisé dans la dDAC étant très sensible à la température et se dépolarisant au-dessus de 130°C, de nouvelles techniques innovantes sont testées par les deux groupes pour tenter de chauffer les échantillons de manière résistive et locale sans endommager l'actionneur piézo. Les premiers résultats obtenus sont encourageants : un chauffage de plusieurs minutes à des températures allant jusqu'à 800°C a été réalisé. La technique de chauffage nouvellement développée devrait permettre d'explorer la dynamique de recristallisation de certains matériaux à l'échelle de la microseconde. La mise en œuvre de cette technique devrait donner lieu à l'avenir à un nouveau projet conjoint à l'EuXFEL. En résumé, la collaboration permet une synergie pour développer la technique de la dDAC et rassembler une force de travail permettant la réalisation d'expériences inédites au XFEL.

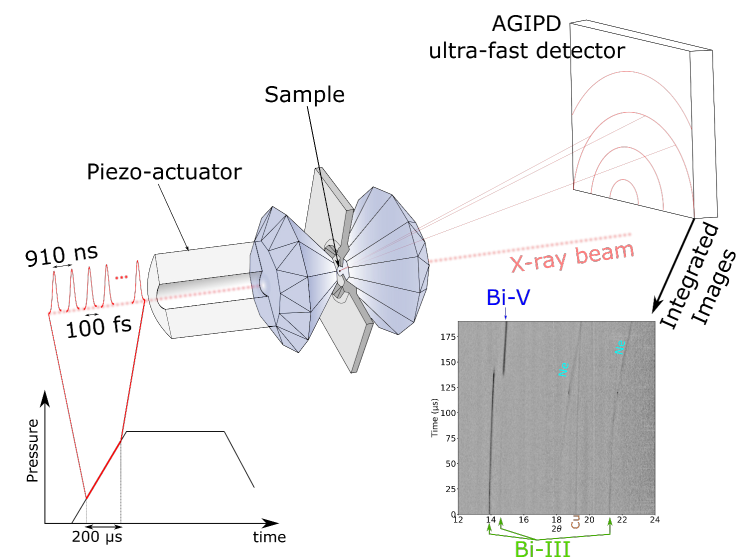


Figure 2
Schéma de l'expérience EuXFEL utilisant la dDAC. Un train d'impulsions de rayons X de 200 μ s est envoyé pendant la compression dynamique de l'échantillon de Bi. Le signal de diffraction des rayons X est enregistré sur un détecteur ultra-rapide AGIPD travaillant à 1.1MHz permettant d'enregistrer un « film » de la compression où la transition de phase Bi-III – Bi-V peut être observée.

Schematic setup of the EuXFEL experiment using the dDAC. An x-ray pulse train of 200 μ s is sent during the dynamic compression of the Bi-Sample. X-ray diffraction signal is acquired on an AGIPD ultra-fast detector working at 1.1MHz allowing recording a “film” of the compression where the Bi-III – Bi-V phase transition can be observed.

For the design of ICF (Inertial Confinement Fusion) experiments, we run multi-physics codes on supercomputers, either for NIF or for LMJ laser facilities. These codes are highly complex because of the involved physics (propagation of lasers in a plasma that is moving, emitting and absorbing radiations) discretized by different numerical methods that perform well on supercomputers. Spatial and temporal scales may be very different according to the considered physical process: a ICF target is millimeter when the scale of radiative emission is atomic (it depends on the electronic configuration of atoms).

Deep learning is a mature technology that allows creating models based on data, even high-dimensional or irregular. A simulation program for ICF produces data massively, and uses now hybrid supercomputer that may also train deep learning models. The training is the process to create data-based models; it may use for instance a lot of GPUs. Finally yet importantly, powerful tools had been developed to construct deep learning models for quantification of uncertainties and calibration in the NIF program.

In this favorable context, we began this DAM-NNSA collaboration by a proof of concept **[Klu20]**: we have extracted plasma and radiative conditions during an ICF-like simulation, then we have used the code that gives spectral opacities to produce opacity data in these conditions, and finally we have trained a deep learning model. Then we showed that the same simulation using the deep learning model is faster by a factor 7, with acceptable errors. Parallelism can easily improve this factor 7: a deep learning model is much easier to parallelize than the code giving opacities. This data-based deep learning model is in high dimension (around 100) and with irregular profiles (see *Figure 1*): we have initially chosen a hard problem, for which deep learning seems to be the only machine learning candidate.

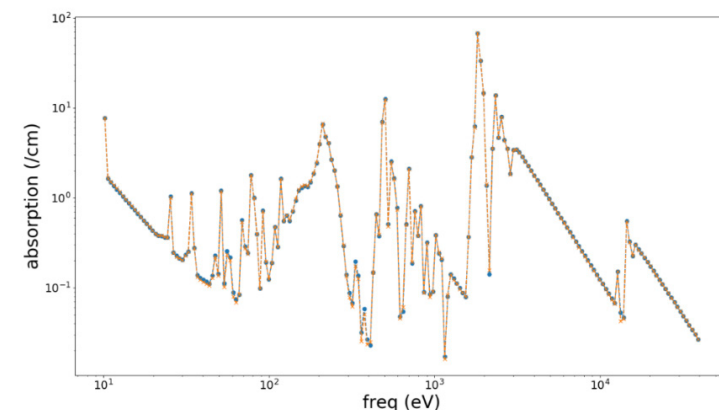


Figure 1. Absorption spectrum for krypton at given density, temperature and spectral radiative intensity. The orange curve is given by the opacity code and the blue point by the deep neural network.

In ICF simulation programs, it really changes the situation, as one of the most costly part almost disappears in the CPU total cost. To be more accurate, the cost has been deported in the training process of the model, which is done less often, and which is decoupled from the other parts of the code. More generally, the methodology developed here paves the way for other physics, or for multi-scale simulations, if we achieve to encapsulate the lower-scale simulations in a given perimeter.

Many questions arise after this work that we tackle in this collaboration. The first one is about the confidence we can have in the obtained model. We have to find a process that guarantees the results for the ICF expert. It may be a post-process done after each use of the deep learning model, or the definition of a perimeter of validity, which implies to define a distance from new data to the training data-set. We may also extend this perimeter with active learning, meaning that when we meet new data, we re-train new models on-the-fly that include these new data. The second axis of the collaboration is the extension of this work to more realistic simulations. It allows reaching new types of simulations, that were unreachable before because of the CPU cost (of the collisional-radiative code) or the memory capacity (of the atomic description). For instance, we train models based on 2D simulations, and use it in 3D ones. The number of cells in a mesh grows drastically when going to higher dimension and so does the cost of opacities, as these opacity calculations are done several times per cell. Thus, without a deep learning model, we may use a costly opacity model in 2D, but not in 3D. Finally, we also want to extend this method to equations of state. In that case, we have to consider first derivatives of pressures and energies, and how can we constrain it.

The computing framework is of great importance to support the use of such models in simulations on supercomputers. We are currently working to automate training, inline prediction, validation and re-train, optimized for high-performance computing. This work entails a check on the model during inference to understand how well the model can give a prediction for the given input. If the model cannot make a valid prediction, we rely on the more computationally expensive NLTE calculation and log the query for future retraining. As training iterations continue, the neural network becomes more generalizable across the application domain.

Le dimensionnement des expériences de FCI (Fusion par Confinement Inertiel), que ce soit sur l'installation laser NIF ou LMJ, fait appel à des codes de calcul s'exécutant sur des supercalculateurs. La physique impliquée dans ces expériences (propagation d'un laser dans un plasma en mouvement qui absorbe et émet du rayonnement) et les diverses méthodes numériques associées rendent ces codes multi-physiques complexes. Les échelles spatio-temporelles d'intérêt sont très différentes : une cible FCI est millimétrique alors que l'échelle de l'interaction rayonnement-matière est atomique (elle dépend des configurations électroniques des atomes). L'opacité spectrale, la grandeur physique régissant cette interaction, est calculée au sein d'un module de physique atomique.

L'apprentissage statistique est une technologie mature qui permet de créer des modèles basés sur les données, même en grandes dimensions ou irrégulières. Un programme de simulation de FCI produit massivement des données, et utilise des supercalculateurs hybrides dont les cartes graphiques sont aussi utilisées par ailleurs pour la phase d'entraînement lors de la création de modèles reposant sur des réseaux de neurones profonds.

Dans ce contexte favorable, nous avons démarré la collaboration DAM-NNSA par une preuve de concept **[Klu20]** : nous avons extrait d'une simulation de type FCI les conditions atteintes par le plasma et le rayonnement ambiant, utilisé le module de physique atomique pour produire des données d'opacité spectrales à partir de ces conditions, et enfin entraîné un réseau de neurones profond à les reproduire. Ensuite, nous avons montré que la même simulation utilisant le réseau de neurones, plutôt que le module utilisé en ligne, est plus rapide d'un facteur 7, avec des erreurs acceptables. Ce facteur 7 est facilement améliorable en parallélisant le modèle neuronal, bien plus facile à paralléliser que le code de physique atomique. Les réseaux de neurones profonds sont bien adaptés à ce problème d'apprentissage statistique en grande dimension (environ 100) et avec des données à approcher très irrégulières (voir *Figure 1*).

Dans les simulations de FCI, cette partie extrêmement coûteuse disparaît ainsi presque des coûts calcul. Pour être plus précis, le coût a été déporté dans la phase d'entraînement

du modèle, qui est effectuée moins souvent et qui est découplée des autres modules du code. De manière générale, cette utilisation de l'apprentissage statistique profond ouvre des perspectives pour des applications à d'autres physiques, dans le cadre des simulations multi-échelles.

Le travail engagé au cours de cette collaboration a permis de soulever de nombreuses questions. La première concerne la confiance que l'on peut avoir en ces simulations. Nous devons trouver une méthode qui garantisse les résultats à l'expert de FCI. Cela peut être un post-traitement effectué après chaque utilisation des réseaux de neurones, ou la définition d'un périmètre de validité étendu par un entraînement actif. Un deuxième axe de la collaboration consiste à étendre la preuve de concept à des simulations de FCI plus réalistes. Cela nous permet d'effectuer des simulations jusqu'alors inaccessibles soit à cause de leur coût calcul soit à cause de leur empreinte mémoire. Par exemple, nous entraînons des modèles basés sur des simulations 2D et les utilisons dans des simulations 3D. Enfin, nous allons aussi étendre ce travail aux équations d'état ; nous devons alors considérer les dérivées premières des énergies et des pressions, avec la possibilité de les calculer par différentiation automatique.

La plateforme informatique sera très importante pour généraliser l'utilisation de tels modèles dans les simulations. Il faut automatiser et optimiser pour le calcul haute-performance les entraînements, les prédictions en ligne, la validation et le réentraînement. Ce travail implique une vérification pendant l'inférence. Si le modèle ne peut fournir une prédiction correcte, nous ferons appel au module de physique atomique en ligne, et enregistrerons les données pour un futur réentraînement. Au fur et à mesure des simulations, le réseau de neurones améliorera sa capacité prédictive par l'extension de son périmètre d'application.

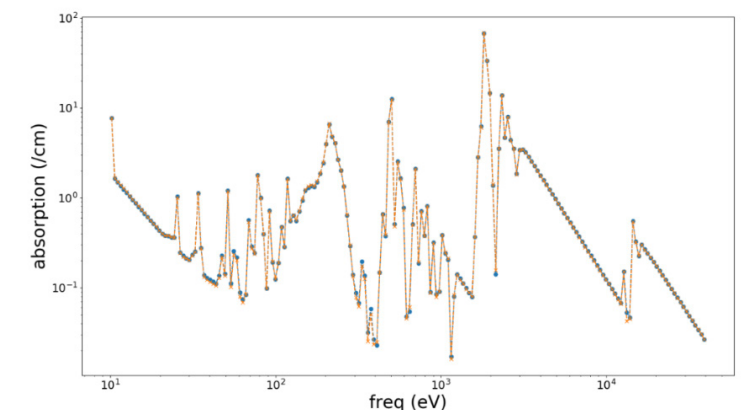


Figure 1 Spectre d'absorption du krypton pour une densité, une température et une intensité radiative spectrale données. La courbe orange est donnée par le code d'opacités et les points bleus par le réseau de neurones profond.

CEA-DAM: Gramat, Le Ripault

Los Alamos National Laboratory

A. Lefrancois, V. Chuzeville, Y. Barbarin, M. Genetier, D. Picart
J. Jordan, D. Dattelbaum, R. Huber, J. Lang, D. Tasker

The project number P208 related to Pressure measurements in HE (High Explosives) was approved in the beginning of 2021. During the last year, the team has met virtually to exchange their current status related to piezoresistive diagnostics and related applications, define specific collaboration topics for continuing work, and determine a joint experimental plan for the next 2-3 years. Both the LANL and CEA already have programs to gain a deeper understanding of High Explosives (HE) behavior through experimental and theoretical/computational means. Experimental longitudinal and/or transverse stress measurements have been developed and used as a legacy diagnostic. Calibration issues with the manufacturer's piezoresistive coefficients, differences in the gauges, and electric component obsolescence have been recently identified. Therefore, collaborative work has been discussed on gauge power supplies and designs to improve the conditioning set-up to minimize the influence of the cable length and to increase the bandwidth in order to better understand the transient phenomena and to reduce the uncertainties. The

gauge size and integration are also potential areas of interest. The application domains of these stress measurements include validation of constitutive material models under shock conditions up to the Shock to Detonation Transition (SDT) processes and require a multi-disciplinary assessment. Both this deeper understanding, and quantitative data on specific HEs, are needed to improve material models and reactive thresholds used in state-of-the-art hydrocodes within LANL and CEA. The chosen collaborative topics are viscoelastic comparisons between manganin and ElectroMagnetic (EM) gauges in simple polymer, bridge circuits/signal conditioning systems, response time in gauges compared with reverse ballistic PDV (Photonic Doppler Velocimetry)/VISAR (Velocity Interferometer System for Any Reflector) experiments, reaction in pressed HMX-based explosives and development of manganin gauges with smaller, more sensitive elements. The work has started on the comparison of the viscoelastic PMMA results (cf. *Figures 1 and 2*), in order to understand details of the data reduction processes to resolve differences.

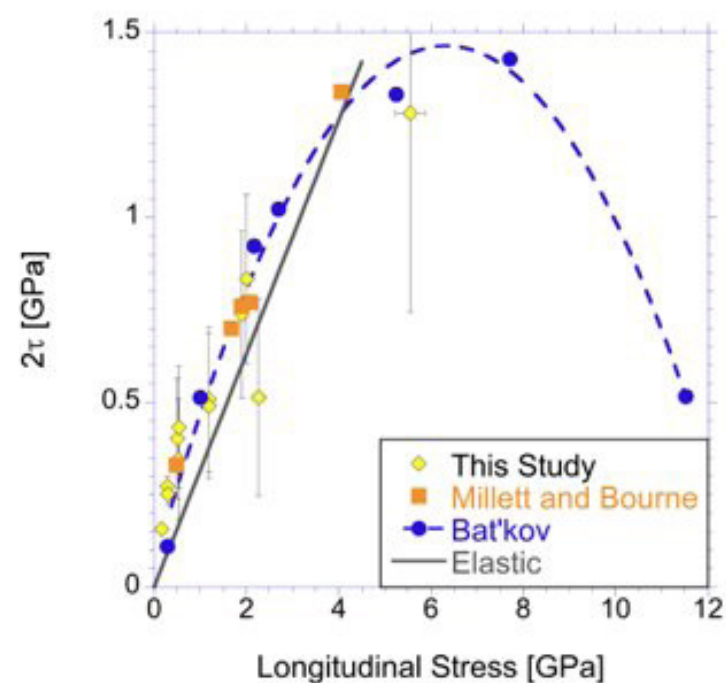


Figure 1.
Shear stress versus normal stress [Jor16].

Contrainte de cisaillement versus contrainte normale [Jor16].

A. Lefrancois, V. Chuzeville, Y. Barbarin, M. Genetier, D. Picart
J. Jordan, D. Dattelbaum, R. Huber, J. Lang, D. Tasker

Le projet P208 relatif à la mesure de pression dans les explosifs a été approuvé début 2021. Les équipes se sont ensuite réunies virtuellement pour échanger sur les méthodes utilisées, les applications et les résultats acquis jusqu'à présent relatifs aux diagnostics piezorésistifs notamment, ainsi que pour définir les thèmes spécifiques de la collaboration et pour déterminer un programme expérimental de travail commun. Le LANL et le CEA ont déjà leurs propres programmes pour approfondir la compréhension du comportement de l'explosif au travers de moyens expérimentaux et numériques. Les mesures de contraintes longitudinale et transverse ont été développées et sont utilisées comme un diagnostic de référence. Les difficultés de calibrage avec les coefficients de sensibilité des jauges résistives du fabricant, les différences entre les jauges et l'obsolescence des composants électroniques sont des thématiques d'études identifiées récemment. C'est pourquoi, un premier travail collaboratif a été défini sur l'alimentation en puissance des jauges et sur la chaîne de mesure pour améliorer le conditionnement, réduire l'influence de la longueur des câbles et augmenter la bande passante. Il s'agit de mieux comprendre les phénomènes transitoires et de réduire les incertitudes. La dimension des

CEA-DAM: Gramat, Le Ripault

Los Alamos National Laboratory

jauges et leur intégration est également un sujet d'intérêt. Les domaines d'application de ces mesures de contrainte sont la validation des lois de comportement sous choc jusqu'à la Transition Choc Détonation (TCD). Cela requiert une expertise interdisciplinaire. Une compréhension approfondie et des données quantitatives sur des explosifs spécifiques sont nécessaires pour améliorer la modélisation des matériaux et les seuils de réactivité utilisés dans les codes de calcul de référence au sein du LANL et du CEA. Les thèmes retenus pour la collaboration sont le comportement viscoélastique et les comparaisons entre les jauges manganin et les jauges multibrins dans les polymères notamment, les ponts de Wheatstone et les méthodes de conditionnement du signal, une comparaison des temps de réponse des jauges avec ceux de l'interférométrie laser, la réactivité dans les explosifs comprimés à base d'octogène et le développement de jauges manganin avec des éléments plus sensibles et plus petits. Ce travail a débuté avec la comparaison des résultats d'expérimentations d'impact symétrique sur le PMMA (cf. *Figures 1 et 2*), afin d'identifier les écarts via l'analyse détaillée des données.

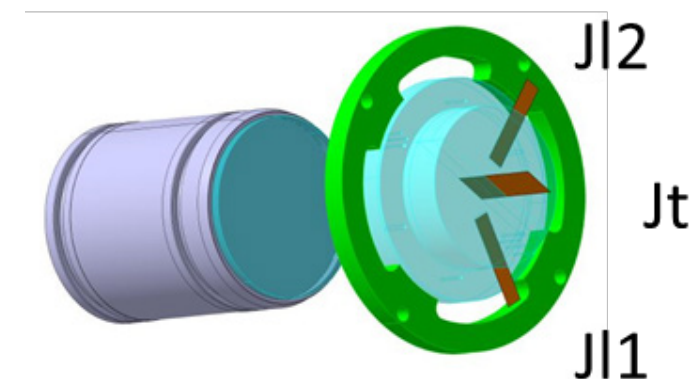


Figure 2.
Configuration d'impact symétrique sur le PMMA, deux jauges longitudinales (J1) et une jauge transverse (Jt).

Symmetrical impact configuration on PMMA, two longitudinal gauges (J1) and one transverse gauge (Jt).

METHODOLOGIES FOR ACCURATE DETERMINATION OF THE REFRACTIVE INDEX OF MATERIALS IN THE X-RAY SPECTRAL RANGE

CEA-DAM Île-de-France
CEA-Saclay
Université Paris-Saclay

Lawrence Livermore National Laboratory

A. Rousseau
Y. Ménesguen, M.-C. Lépy
F. Delmotte, E. Papagiannouli

R. Soufli, C. Burcklen, M.-A. Descalle

The tabulated refractive index of materials in the extreme ultraviolet and x-ray spectral range (15 eV to 100 keV photon energies), which in many cases relies on decades-old data, is inaccurate for many essential materials for NNSA and CEA-DAM science and technology applications including x-ray lasers, target diagnostics and plasma physics. This is due to various challenges associated with measurements in this spectral range, including materials sensitivity to surface roughness, oxidation and contamination, the need for free-standing thin films with high purity, and the availability of precisely calibrated light sources and metrology facilities. This issue becomes most pronounced in the vicinity of electronic absorption edges where fine structure is present: currently, the tabulated refractive index values for most materials do not include near-edge fine structure, leading to large discrepancies between as-designed and experimental performance [Del22, Del18, Sou19, Mén15]. Such serious deficiencies are prohibiting the design and realization of efficient instrumentation and data interpretation.

Lawrence Livermore National Lab (LLNL) and Laboratoire Charles Fabry (LCF), in collaboration with the Center for X-ray Optics at Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) have been developing methodologies and have measured the refractive index of important materials in the 15 – 1300 eV range via transmittance measurements on freestanding films (Figure 1), as well as via reflectance measurements, at beamline 6.3.2 of the Advanced Light Source (ALS) synchrotron at LBNL [Del22, Del18, Sou19]. The Laboratoire National Henri Becquerel (LNHB) has developed an original method to derive absolute mass attenuation coefficients of elements from x-ray transmittance measurements of thin metallic foils starting at photon energies as low as 100 eV and up to 60 keV [Mén15]. The LNHB measured new mass attenuation coefficients for more than thirty elements and is still performing new measurements to complete its database [Mén19] (Figure 2).

By leveraging complementary, state-of-the-art methodologies and by validating data in overlapping spectral regions, this work aims towards determining the most accurate values for the mass attenuation coefficients together with their associated uncertainties, that are often missing or poorly documented. These coefficients, which represent the absorptive part of the refractive index, are already very useful for applications such as x-ray fluorescence quantification and atomic and molecular physics. They are also essential in order to calculate the dispersive portion of the refractive index by the Kramers-Kronig formalism.

MÉTHODOLOGIE POUR LA DÉTERMINATION PRÉCISE DE L'INDICE DE RÉFRACTION DES MATÉRIAUX DANS LE DOMAINE SPECTRAL DES RAYONS X

A. Rousseau
Y. Ménesguen, M.-C. Lépy
F. Delmotte, E. Papagiannouli

R. Soufli, C. Burcklen, M.-A. Descalle

Dans la gamme spectrale de l'ultraviolet extrême et des rayons X (énergies photoniques de 15 eV à 100 keV), les indices de réfraction des matériaux tabulés correspondent généralement à des données datant de plusieurs décennies, dont la précision s'avère insuffisante pour de nombreux matériaux essentiels aux applications scientifiques et technologiques de NNSA et de CEA-DAM, notamment les lasers à rayons X, le diagnostic des cibles et la physique des plasmas.

Ce manque de données précises est dû aux nombreux défis associés aux mesures dans cette gamme spectrale, notamment la sensibilité à la rugosité de surface, à l'oxydation et à la contamination des matériaux, la nécessité de disposer de films minces autosupportés de grande pureté, et la disponibilité de sources de photons et d'équipements métrologiques précisément étalonnés. Ce problème est encore plus prononcé au voisinage des seuils d'absorption en raison de leur structure fine: actuellement, les valeurs d'indice de réfraction tabulées pour la plupart des matériaux ne tiennent pas compte de la structure fine au voisinage des seuils, ce qui entraîne des écarts importants entre les performances théoriques et expérimentales [Del22, Del18, Sou19, Mén2015]. Ces graves lacunes empêchent la conception et la réalisation d'une instrumentation performante ainsi que l'interprétation de données.

Le Lawrence Livermore National Lab (LLNL) et le Laboratoire Charles Fabry (LCF), en collaboration avec le Center for X-ray Optics du Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL) ont développé des méthodologies pour déterminer l'indice de réfraction de matériaux importants dans la gamme

CEA-DAM Île-de-France
CEA-Saclay
Université Paris-Saclay

Lawrence Livermore National Laboratory

15 – 1300 eV, grâce à des mesures en transmission sur des films autosupportés (Figure 1), ainsi que par des mesures en réflexion, effectuées sur la ligne 6.3.2 du synchrotron Advanced Light Source (ALS) au LBNL [Del22, Del18, Sou19]. Le Laboratoire National Henri Becquerel (LNHB) a développé une méthode originale pour déterminer les coefficients d'atténuation massique absolus des matériaux, à partir de mesures de transmittance des rayons X sur des cibles métalliques minces, dans la gamme d'énergie de 100 eV jusqu'à 60 keV [Mén15]. Le LNHB a ainsi mesuré de nouveaux coefficients d'atténuation massique pour une trentaine d'éléments et effectue en permanence de nouvelles mesures pour compléter sa base de données [Mén19] (Figure 2).

En s'appuyant sur des méthodologies de pointe complémentaires et en validant des données dans des régions spectrales qui se recouvrent, ce travail vise à déterminer plus précisément les valeurs des coefficients d'atténuation massique, ainsi que les incertitudes associées, qui sont souvent manquantes ou mal documentées. Ces coefficients, qui représentent la partie absorbante de l'indice de réfraction, sont déjà très utiles pour des applications telles que l'analyse quantitative par fluorescence X et la physique atomique et moléculaire. Ils sont également indispensables pour calculer la partie dispersive de l'indice de réfraction par le formalisme de Kramers-Kronig.

Figure 1. Top left: Transmittance (log scale) spectra measured at beamline 6.3.2 of the ALS synchrotron at LBNL, on three Cr films with thickness of 17, 38 and 57 nm (plus a 3 nm oxide layer). The green vertical line illustrates the transmittance values at a given photon energy (72.1 eV), shown in the adjacent plot (top right). The inset shows details of the Cr L2,3 edge region. Top right: Measured transmittance vs. Cr thickness. The slope of each line is the Cr linear absorption coefficient at that photon energy. The intercept at zero Cr thickness is the transmittance of the 3 nm oxide on top of each Cr film. Bottom: δ (left) and β (right) values (black solid line) of the complex refractive index (n = 1 - δ + iβ) of Cr determined in this work. Tabulated values [HenWeb] are shown for comparison (red dash line). The inset shows details of the Cr L2,3 edge. β was determined directly from the measured Cr absorption coefficient, while δ was determined via the Kramers-Kronig transformation [Del18].

En haut à gauche: Spectres de transmittance (échelle logarithmique) mesurés sur la ligne 6.3.2 du synchrotron ALS au LBNL, sur trois films de Cr d'une épaisseur de 17, 38 et 57 nm (avec une couche d'oxyde de 3 nm). La ligne verticale verte illustre les valeurs de transmittance à une énergie photonique donnée (72,1 eV), indiquée dans le graphe adjacent (en haut à droite). L'encart montre les détails de la région du seuil L2,3 du chrome. En haut à droite: Transmittance en fonction de l'épaisseur de Cr. La pente de chaque ligne correspond au coefficient d'absorption linéique du Cr pour cette énergie photonique. L'intersection à épaisseur nulle de Cr est la transmittance de l'oxyde de 3 nm au-dessus de chaque film de Cr. En bas: Les constantes optiques δ (à gauche) et β (à droite) de l'indice de réfraction complexe (n = 1 - δ + iβ) du Cr déterminées dans ce travail (ligne continue noire). Les valeurs tabulées [HenWeb] sont indiquées à titre de comparaison (ligne pointillée rouge). L'encart montre les détails de la région du seuil L2,3 de Cr: β a été déterminé directement à partir du coefficient d'absorption du Cr mesuré, tandis que δ a été déterminé via la transformation de Kramers-Kronig [Del18].

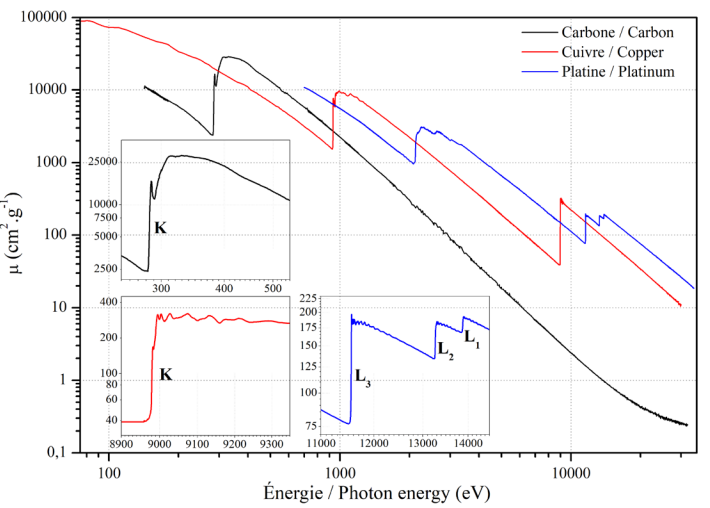


Figure 2. Exemple de mesures de coefficients d'atténuation massique pour le carbone, le cuivre et le platine, incluant les détails de la structure fine près des seuils d'absorption.

Example of measured mass attenuation coefficients for carbon, copper and platinum including details of the fine structure close to the absorption edges.

Organismes partenaires / Partner agencies

CALTECH: California Institute of Technology, USA.

CEA: Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives, France; French Alternative Energies and Atomic Energy Commission, France.

CENBG: Centre d'études nucléaires de Bordeaux-Gradignan, France; Nuclear Research Center of Bordeaux Gradignan, France.

DAM: Direction des applications militaires du CEA; French Military Applications Division within CEA.

DIF ou/ou CEA/DIF: Centre Île-de-France de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA; One of the centers within CEA French Military Applications Division.

DOE: Department of Energy, USA.

EC-JRC-IRMM: The Institute for Reference Materials and Measurements (IRMM) is one of the seven institutes of the Joint Research Centre (JRC), a Directorate-General of the European Commission (EC), Geel, Belgium

ESRF: European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France.

FUSTIPEN: Institut Franco-Américain de physique théorique dédié à l'étude des noyaux exotiques au GANIL, Caen, France; French US. Theory Institute for Physics with Exotic Nuclei at GANIL, Caen, France.

Gramat ou/ou CEA/Gramat: Centre de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA. One of the centers within CEA French Military Applications Division.

LANL: Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, USA.

LETI: Laboratoire d'électronique et de technologies de l'information de la Direction de la recherche technologique du CEA, Grenoble, France; Electronics and information technologies laboratory within the CEA Technological Research Division (ORT), Grenoble, France.

LLNL: Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, California, USA.

Le Ripault ou/ ou CEA Le Ripault: Centre de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA; One of the centers within CEA French Military Applications Division.

NNSA: National Nuclear Security Administration, USA.

ORNL: Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, USA.

Rensselaer Polytechnic Institute: School of Engineering, Department of Mechanical, Aerospace, and Nuclear Engineering (MANE), Troy, New York, USA.

SNL: Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico, USA.

3 Degrees of Separation (3DS), Inc.: Consulting and instrument development company specializing in multi-dimensional, high-speed and micro-fabricated gas chromatography. Dayton, Ohio, USA.

Valduc ou/ou CEA Valduc: Centre de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA; One of the centers within CEA French Military Applications Division.

Grands instruments/ Large facilities

CALIBAN: Réacteur nucléaire pulsé à combustible métallique fortement enrichi au CEA Valduc; Compact experimental pulsed-type reactor with a highly enriched metallic core at CEA Valduc.

DANCE: Detector for Advanced Neutron Capture Experiments at LANSCE.

FIGARO: Fast Neutron-Induced GammaRay Observer at LANSCE.

GANIL: Grand accélérateur national d'ions lourds, Caen, France; National Large Heavy Ion Accelerator, Caen, France.

GEANIE: Germanium Array for Neutron Induced Excitations.

GODIVA IV: Réacteur nucléaire pulsé à combustible métallique fortement enrichi au LANL; Pulsed-type nuclear reactor with a highly enriched metallic core at LANL.

HFIR: High Aux Isotope Reactor at ORNL.

LANSCE: Los Alamos Neutron Science Center Los Alamos, New Mexico, USA.

LSDS: Spectromètre à ralentissement dans le plomb au LANSCE; Lead Slowing-Down Spectrometer at LANSCE.

LTD 1 MV: Linear Transformer Driver pour la radiographie X éclair au PEM; Linear Transformer Driver (LTD) Development for Flash X-ray Radiography at PEM.

MLNSC: Manuel Lujan Neutron Scattering Center.

Moronvilliers and/or PEM: Polygone d'expérimentation de Moronvilliers rattaché au CEA/DIF; Experimental facility within CEA/DIF.

Accélérateur tandem /Tandem Accelerator: Accélérateur électrostatique de type Van de Graaff dont la tension maximale est de 15 MV. Orsay, France; Van de Graaff electrostatic accelerator type with a nominal voltage of 15 MV, Orsay, France.

SIDONIE: Séparateur d'isotopes électromagnétique à Orsay, France; Electromagnetic isotope separator at Orsay, France.

STARS-LIBERACE: Silicon Telescope Array for Reaction Studies (STARS) - Livermore Berkeley Array for Collaborative Experiments (LIBerACE) at Livermore, California. Such detector arrays consist of charged-particle and -y-ray detection capabilities.

URSA Minor LTD: Upgraded Sandia LTD system for Flash X-ray Radiography at SNL.

WNR: Weapons Neutron Research facility at LANSCE.

[Adv21] Advanced Manufacturing for Energy and Transportation International School, *EDP Sciences* (2021).

[Bai15] J. E. Bailey et al., *Nature* **56**, 517 (2015).

[Bau13] E. Bauge et al., *Eur. Phys. J. A* **48**, 113 (2013).

[Baug18] E. Bauge, D. A. Rochman, *EPJ Nuclear Sci. Technol.* **4**, 35 (2018). <https://doi.org/10.1051/epjn/2018011>.

[Bél15] G. Bélier et al. *Phys. Rev. C* **91**, 044605 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.91.044605>.

[Bou09] Bouyer V., Sheffield S. A., Dattelbaum D. M., Gustavsen R. L. “Experimental measurements of the chemical reaction zone of detonating liquid explosive”, *Shock Compression and Condensed Matter*, 177-180 (2009). <https://doi.org/10.1063/1.3295096>.

[Bou12] G. Boutoux et. al., *Phys. Lett. B* **712**, 319 (2012). <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2012.05.012>

[Bou12a] Bouyer V., Hebert P., Sollier A., Crouzet B., Dattelbaum D., Sheffield S., Gustavsen R., Cooper M., Trott W., “Shock initiation and detonation of high explosives”, *CEA FOCUS*, **No. 3**, (2012).

[Bou12b] Bouyer V. et al., “Experimental measurements of the chemical reaction zone of TATB and HMX based explosives”, *AIP Conf. Proc.*, **1426**, 209-212 (2012). <https://doi.org/10.1063/1.3686256>.

[Bra17] Branch, B. et al., *J. Appl. Phys.* **121** (13), 135102 (2017). <https://doi.org/10.1063/1.4978910>.

[Bra19] Branch B. et al., *Polymer*, **160**, 325-337 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2018.10.074>.

[Bry15] Analysis of laser shock experiments on pre-compressed samples using a quartz reference and application to warm dense hydrogen and helium. S. Brygoo et al. *J. Appl. Phys.* **118**, 195901 (2015). <https://doi.org/10.1063/1.4935295>.

[Bry21] Evidence of hydrogen-helium immiscibility mixtures at Jupiter interior conditions. S. Brygoo, P. Loubeyre, M. Millot, J. Rygg, P. Celliers, J. Eggert, R. Jeanloz and G. Collins. *Nature* **593**, 517 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03516-0>.

[Ch22] E. Chimanski et al., to be submitted, 2022.

[Cel18] Insulator-metal transition in dense fluid deuterium. P. Celliers et al. *Science*. **361**, 677-682 (2018). <https://doi.org/10.1126/science.aat0970>.

[Cel10] The insulator to conducting transition in dense fluid helium. P. Celliers, P. Loubeyre, J. Eggert, S. Brygoo, R. McWilliams, D. Hicks, T. Boehly, R. Jeanloz and G. Collins. *Phys. Rev. Lett.* **104**, 184503 (2010). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.184503>.

[Cun17] Cunningham, G. S., Loridan, V., Ripoll, J.-F., & Schulz, M. (2018). Neoclassical diffusion of radiation-belt electrons across very low L-shells. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, **123**, 2884–2901. <https://doi.org/10.1002/2017JA024931>.

[Cun20] Cunningham, G. S., Botek, E., Pierrard, V., Cully, C., & Ripoll, J.-F. (2020). Observation of high-energy electrons precipitated by NWC transmitter from PROBA-V low-Earth orbit satellite. *Geophysical Research Letters*, **47**, e2020GL089077. <https://doi.org/10.1029/2020GL089077>.

[Da2007] D. Dashdorj, T. Kawano, P. E. Garrett, J. A. Becker, U. Agvaanluvsan, L. A. Bernstein, M. B. Chadwick, M. Devlin, N. Fotiades, G. E. Mitchell, R. O. Nelson, W. Younes, *Phys. Rev. C* **75**, 054612 (2007). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.75.054612>.

[Dat16] Dattelbaum, D. M. et al. “A comparison of the shock sensitivities and resulting reactive flow of several 2,4,6-trinitrotoluene-based explosives”, *Proc. Int. Det. Symp.*, (2016).

[Dat16a] Dattelbaum, D. M. et al. “Influence of the window characteristics on chemical reaction zone measurements in PBX 9502”, *Proc. Int. Det. Sym.* (2016).

[Del15] O. Delaune et. al., *EPJ Web of Conferences* **93** 02010 (2015). <https://doi.org/10.1051/epjconf/20159302010>.

[Den16] D. Denis-Petit et al., *Phys. Rev. C* **94**, 054612 (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.94.054612>. [Don16] J. M. O’Donnell, *Nucl. Instr. and Meth. A* **805**, 87 (2016). <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2015.07.044>.

[Del18] F. Delmotte, J. Meyer-Ilse, F. Salmassi, R. Soufli, C. Burcklen, J. Rebelatto, A. Jérôme, I. Vickridge, E. Briand and E. Gullikson, *J. Appl. Phys.* **124**, 035107 (2018).

[Del22] F. Delmotte, C. Burcklen, J. Alameda, F. Salmassi, E. Gullikson, R. Soufli, “New method for the determination of photoabsorption from transmittance measurements in the extreme ultraviolet”, *Opt. Express* **30**, 23771-23782 (2022).

[Du06] M. Dupuis, PhD thesis, « Modèles de réactions directes et de pré-équilibre quantique pour la diffusion de nucléons sur des noyaux sphériques », *Université Sciences et Technologies- Bordeaux I*, 2006.

[Du08] M. Dupuis et al., *Phys. Lett. B* **665**, 152 (2008). <http://dx.doi.org/10.1016/j.physletb.2008.05.061>.

[Du11] M. Dupuis et al., *Phys. Rev. C* **83**, 014602 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.83.014602>.

[Du15] M. Dupuis et al., *Eur. Phys. J. A* **51**, 168 (2015). <https://doi.org/10.1140/epja/i2015-15168-x>.

[Du17a] M. Dupuis, *Eur. Phys. J. A* **53**, 111 (2017). <https://doi.org/10.1140/epja/i2017-12293-6>.

[Du17b] M. Dupuis et al., *EPJ Web of Conferences* **146**, 12002 (2017). <https://doi.org/10.1051/epjconf/201714612002>.

[Du19] M. Dupuis et al., *Phys. Rev. C* **100**, 44607 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.044607>.

[Du22] M. Dupuis, T. Kawano, M. Kerveno, S. Hilaire *15th International Conference on Nuclear Data for Science and Technology* ND202221-29 July 2022.

[Eber69] P. J. Ebert, A. F. Lauzon, E. M. Lent (1969). “Transmission and backscattering of 4.0- to 12.0-MeV electrons,” *Phys. Rev.* **183**, 422. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.183.422>

[Ebr19] A. Ebran et al., *Phys. Rev. C* **99**, 064603 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.064603>.

[Egg08] Hugoniot of helium in the ionization regime. J. Eggert, S. Brygoo, P. Loubeyre, R. Williams, P. Celliers, D. Hicks, T. Boehly, R. Jeanloz and G. Collins. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 124503 (2008). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.124503>.

[Eva07] Evans, W. J., Yoo, C. S., Lee, G. W., Cynn, H., Lipp, M. J., & Visbeck, K. (2007). Dynamic diamond anvil cell (dDAC): A novel device for studying the dynamic-pressure properties of materials. *Review of scientific instruments*, **78**(7), 073904. <https://doi.org/10.1063/1.2751409>.

[Fad91] B. A. Faddington, C. K. Ross, D. W. Rogers, (1991). “Angular distribution of bremsstrahlung from 15-MeV electrons incident on thick targets of Be, Al, and Pb,” *Med Phys.* **18**, 727–39. <https://doi.org/10.1118/1.596667>

[Gib20] Gibson, L. L., Dattelbaum, D. M. et al. “Extension of the window correction for Kel-F 800: A near impedance-matched window for high explosives”, *AIP Conference Proc.* **2272**, 040004 (2020). <https://doi.org/10.1063/1.5098993>.

[Gra09] Th. Granier et al., “New measurement of the ²³⁸Pu(n,f) cross-section” *AIP Conference Proceedings* **1175**, 227 (2009). <https://doi.org/10.1063/1.3258228>.

[HenWeb] http://henke.lbl.gov/optical_constants/

[Hila18] S. Hilaire, E. Bauge, P. Chau Huu-Tai, M. Dupuis, S. Péru, O. Roig, P. Romain, S. Goriely, *EPJ Nuclear Sci. Technol.* **4** 16 (2018). <https://doi.org/10.1051/epjn/2018014>. [In22] E. In et al., in preparation, 2022.

[Jan18] M. Jandel et al., *Nucl. Instr. and Meth. A* **882**, 105 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.10.097>.

[Jen19] Jenei, Z., Liermann, H. P., Husband, R., Méndez, A. S. J., Pennicard, D., Marquardt, H., ... & Evans, W. J. (2019). New dynamic diamond anvil cells for tera-pascal per second fast compression x-ray diffraction experiments. *Review of Scientific Instruments*, **90**(6), 065114. <https://doi.org/10.1063/1.5098993>.

[Jor16] J. Jordan, D. Casem, M. Zellner, *J. Dynamic Behavior Materials* (2016) **2**: 372-378. <https://doi.org/10.1007/s40870-016-0071-5>.

[Ke2020] M. Kerveno, M. Dupuis, A. Bacquias, F. Belloni, D. Bernard, C. Borcea, M. Boromiza, R. Capote, C. De Saint Jean, P. Dessagne, J. C. Drohe, G. Henning, S. Hilaire, T. Kawano, P. Leconte, N. Nankov, A. Negret, M. Nyman, A. Olacel, A. J. M. Plompen, P. Romain, C. Rouki, G. Rudolf, M. Stanoiu, R. Wynants, *Phys. Rev. C* **104**, 044605 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.104.044605>.

[Kel20] K. J. Kelly, M. Devlin, J. M. O'Donnell, J. A. Gomez, D. Neudecker, R. C. Haight, T. N. Taddeucci, S. M. Mosby, H. Y. Lee, C. Y. Wu, R. Henderson, P. Talou, T. Kawano, A. E. Lovell, M. C. White, J. L. Ullmann, N. Fotiades, J. Henderson, and M. Q. Buckner, "Measurement of the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ prompt fission neutron spectrum from 10 keV to 10 MeV induced by neutrons of energy 1–20 MeV", *Phys. Rev. C* **102**, 034615 – Published 21 September 2020. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.102.034615>.

[Kel21] K. J. Kelly, P. Marini, J. Taieb, M. Devlin, D. Neudecker, R. C. Haight, G. Bélier, B. Laurent, P. Morfouace, J. M. O'Donnell, E. Bauge, M. B. Chadwick, A. Chatillon, D. Etasse, P. Talou, M. C. White, C. Y. Wu, E. A. Bennett, Comparison of Results from Recent NNSA and CEA Measurements of the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ Prompt Fission Neutron Spectrum, *Nuclear Data Sheets*, **Volume 173**, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2021.04.003>.

[Kel22] K. J. Kelly, J. A. Gomez, M. Devlin, J. M. O'Donnell, D. Neudecker, A. E. Lovell, R. C. Haight, C. Y. Wu, R. Henderson, T. Kawano, E. A. Bennett, S. M. Mosby, J. L. Ullmann, N. Fotiades, J. Henderson, T. N. Taddeucci, H. Y. Lee, P. Talou, and M. C. White, "Measurement of the $^{235}\text{U}(n,f)$ prompt fission neutron spectrum from 10 keV to 10 MeV induced by neutrons of energy from 1 MeV to 20 MeV", *Phys. Rev. C* **105**, 044615 – Published 20 April 2022. <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.105.044615>.

[Klu20] G. Kluth, K. D. Humbird, B. K. Spears, L. Peterson, H. A. Scott, M. V. Patel, J. Koning, M. Marinak, L. Divol, C. Young, « Deep learning for NLTE spectral opacities », *Physics of Plasmas*, **27**, 052707 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0006784>.

[Kon12] A. J. Koning et al., *Nucl. Data Sheets* **113**, 2841 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.nds.2012.11.002>.

[Kon19] A. J. Koning et al., *Nucl. Data Sheets* **155**, 1 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.nds.2019.01.002>.

[Kru21] Kruse et al., *HEDP* **41**, 100976 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.hedp.2022.100976>.

[Lau21] B. Laurent, J. Taieb, G. Bélier, P. Marini, P. Morfouace, "New developments of a fission chamber for very high radioactivity samples", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **Volume 990**, 164966, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.164966>.

[Lee22] Lee K-S. et al., *Mater. Chem. Phys.* (2022).

[Lor18] Loridan, V., Ripoll, J.-F., Tu, W., & Cunningham, G. S. (2019). On the use of different magnetic field models for simulating the dynamics of the outer radiation belt electrons during the October 1990 storm. *Journal of Geophysical Research: Space Physics*, **124**. <https://doi.org/10.1029/2018JA026392>.

[Lou04] Coupling static and dynamic compressions with a laser shock in a diamond anvil cell and the properties of dense fluid hydrogen. P. Loubeyre et al., *High Pressure Research* **24**, 25-31 (2004). <https://doi.org/10.1080/08957950310001635792>.

[Lou12] Equation of state measurements of warm dense hydrogen isotopes. P. Loubeyre et al. *Phys. Rev. B* **86**, 144115 (2012). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.144115>.

[Love21] A. Lovell et al. *Phys. Rev. C* **103**, 014615 (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.014615>.

[Mar20] P. Marini, J. Taieb, B. Laurent, G. Belier, A. Chatillon, D. Etasse, P. Morfouace, M. Devlin, J. A. Gomez, R. C. Haight, K. J. Kelly, J. M. O'Donnell, and K. T. Schmitt, "Prompt-fission-neutron spectra in the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ reaction", *Phys. Rev. C* **101**, 044614 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.101.044614>.

[Mar20a] P. Marevic, N. Schunck, Fission of ^{240}Pu with Symmetry-Restored Density Functional Theory, *Phys. Rev. Lett.* **125** (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.102504>.

[Mar21] P. Marevic, N. Schunck, J. Randrup, R. Vogt, Angular Momentum of Fission Fragments from Microscopic Theory, *Phys. Rev. C* **104** (2021). <https://doi.org/10.1103/physrevc.104.1021601>.

[Mar22] Marini, P., Taieb, J., Neudecker, D., Bélier, G., Chatillon, A., Etasse, D., Laurent, B., Morfouace, P., Morillon, B., Devlin, M., Gomez, J., Haight, R., Kelly, K., O'Donnell, J., "Energy Dependence of Prompt Fission Neutron Multiplicity in the $^{239}\text{Pu}(n,f)$ Reaction", *Physical Review Letters*, to be published in 2022. <https://doi.org/10.1016/j.physletb.2022.137513>.

[Mén2015] Y. Ménesguen, M. Gerlach, B. Pollakowski, R. Unterumsberger, M. Haschke, B. Beckhoff and M. -C. Lépy, *Metrologia* **53**, 7 (2015).

[Mén2019] Y. Ménesguen, C. Dulieu, M.-C. Lépy, "Advances in the measurements of the mass attenuation coefficients", *X-Ray Spectrometry* **48**, 330 (2019).

[Moo19] Moore E. E. et al., "Development of a CALPHAD thermodynamic database for Pu-U-Fe-Ga alloys", *Appl. Sci.*, **9**, 5040 (2019). <https://doi.org/10.3390/app9235040>.

[Mor20] R. More et al., *HEDP* **34**, 100717 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.hedp.2019.100717>.

[Nag16] T. Nagayama et al., *HEDP* **20**, 17-22 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.hedp.2016.05.001>.

[Nag17] T. Nagayama et al., *Phys. Rev. E* **95**, 063206 (2017). <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.95.063206>.

[Nag19] T. Nagayama et al., *Phys. Rev. Lett.* **122**, 235001 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.235001>.

[Neud19] D. Neudecker et al., Templates of expected measurement uncertainties, *Los Alamos National Laboratory Report LA-UR-19-31156* (2019).

[Neud22] D. Neudecker et al., Shedding Light on the ^{239}Pu Fission Source Term with New High-precision Experiments and Advanced Fission Modeling, *Frontiers in Physics*, to be submitted (2022).

[No11] G. P. A. Nobre et al., *Phys. Rev. C* **84**, 064609 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.84.064609>.

[Nog19] G. Noguere et al., *Phys. Rev. C* **100**, 065806 (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.100.065806>.

[Okum22] S. Okumura et al. *JNST* **59**, 96 (2022). <https://doi.org/10.1080/00223131.2021.1954103>.

[Pat19] Patent assigned to CEA #1900674 (2019).

[Per14] Perron, A. et al., "Thermodynamic re-assessment of the Pu-U system and its application to the ternary Pu-U-Ga system", *J. Nucl. Mater.*, **454**, p. 81-95 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.07.051>.

[Per15] Perron, A. et al., "The Pu-U-Am system: An ab initio informed CALPHAD thermodynamic study", *J. Nucl. Mater.*, **458**, p. 425-441 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2014.12.101>.

[Per16] Perron, A. et al., "Thermodynamic assessments and inter-relationships between systems involving Al, Am, Ga, Pu, and U", *J. Nucl. Mater.*, **482**, p. 187-200 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.09.012>.

[Reg16a] D. Regnier, M. Verriere, N. Dubray, N. Schunck, FELIX-1.0: A finite-element solver for the time-dependent generator coordinate method with the Gaussian overlap approximation, *Comput. Phys. Commun.* **200** (2016). <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.11.013>.

[Reg16b] D. Regnier, N. Dubray, N. Schunck, M. Verriere, Fission fragment charge and mass distributions in $^{239}\text{Pu}(n,f)$ in the adiabatic nuclear energy density functional theory, *Phys. Rev. C* **93** (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.054611>.

[Reg18] D. Regnier, M. Verriere, N. Dubray, N. Schunck, FELIX-2.0: New version of the finite element solver for the time dependent generator coordinate method with the Gaussian overlap approximation, *Comput. Phys. Commun.* **225** (2018). <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.12.007>.

[Reg19] D. Regnier, N. Dubray, N. Schunck, From asymmetric to symmetric fission in the fermium isotopes within the time-dependent generator-coordinate-method formalism, *Phys. Rev. C* **99** (2019). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.024611>

[Regn21] D. Regnier et al., Towards an exact Bayesian inference of nuclear data, Nuclear Energy Agency *JEFF meetings*, April 2021, [jefdoc-2036](#) (2021) and April 2022, [jefdoc-2122](#) (2022).

[Rip14] Ripoll, J.-F., J. M. Albert, and G. S. Cunningham (2014), Electron lifetimes from narrowband wave-particle interactions within the plasmasphere, *J. Geophys. Res. Space Physics*, **119**. <https://doi.org/10.1002/2014JA020217>.

[Rip14a] Ripoll, J.-F., Y. Chen, J. Fennell, R. Friedel, On long decay rates of electrons in the vicinity of the slot region observed by HEO 3, *J. Geophys. Res. Space Physics*, **119**. <https://doi.org/10.1002/2014JA020449>.

[Rip15] Ripoll, J.-F., V. Loridan, G. S. Cunningham, G. D. Reeves, and Y. Y. Shprits (2016), On the time needed to reach an equilibrium structure of the radiation belts, *J. Geophys. Res. Space Physics*, **121**. 7684–7698. <https://doi.org/10.1002/2015JA022207>.

[Rip16] Ripoll, J.-F., et al. (2016), Reproducing the observed energy-dependent structure of Earth’s electron radiation belts during storm recovery with an event-specific diffusion model, *Geophys. Res. Lett.*, **43**, 5616–5625. <https://doi.org/10.1002/2016GL068869>.

[Rip17] Ripoll, J.-F., O. Santolík, G. D. Reeves, W. S. Kurth, M. H. Denton, V. Loridan, S. A. Thaller, C. A. Kletzing, and D. L. Turner (2017), Effects of whistler mode hiss waves in March 2013, *J. Geophys. Res. Space Physics*, **122**. <https://doi.org/10.1002/2017JA024139>.

[Rip18] Ripoll, J.-F., V. Loridan, M. Denton, G. Cunningham, G. Reeves, O. Santolik, J. Fennell, D. Turner, A. Drozdov, J. Cervantes Villa, M. Henderson and A. Ukhorskiy, Observations and Fokker-Planck Simulations of the L-Shell, Energy, and Pitch Angle Structure of Earth’s Electron Radiation Belts During Quiet Times, *AGU 100 Journal of Geophysical Research: Space Physics*. <https://doi.org/10.1029/2018JA026111>,

[Rip18a] Ripoll, J.-F., T. Farges, E. H. Lay, and G. S. Cunningham, Local and Statistical Maps of Lightning-Generated Wave Power Density Estimated at the Van Allen Probes Footprints from the World-Wide Lightning Location Network Database, *AGU100 Advancing Earth and Space Science*. <https://doi.org/10.1029/2018GL081146>.

[Rip20] Ripoll, J.-F., T. Farges, D. M. Malaspina, E. H. Lay, G. S. Cunningham, G. B. Hospodarsky, Analysis of Electric and Magnetic Lightning-Generated Wave Amplitudes Measured by the Van Allen Probes, *Geophysical Research*. <https://doi.org/10.1029/2020GL087503>.

[Rip20a] Ripoll, J.-F., M. H. Denton, D. P. Hartley, G. D. Reeves, D. Malaspina, G. S. Cunningham, O. Santolík, S. A. Thaller, V. Loridan, J. F. Fennell, D. L. Turner, W. S. Kurth, C. A. Kletzing, M. G. Henderson, A. Y. Ukhorskiy (2020), Scattering by whistler-mode waves during a quiet period perturbed by substorm activity, *Jour. of Atmospheric and Solar-Terrestrial Physics*. <https://doi.org/10.1016/j.jastp.2020.105471>.

[Rip21] Ripoll J.-F., Farges T., Malaspina D. M., Cunningham G. S., Hospodarsky G. B., Kletzing C. A. and Wygant J. R. (2021) Propagation and Dispersion of Lightning-Generated Whistlers Measured from the Van Allen Probes. *Front. Phys.* **9**:722355. <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.722355>.

[Rip21a] Ripoll, J.-F., Farges, T., Malaspina, D. M., Cunningham, G. S., Lay, E. H. et al. Electromagnetic power of lightning superbolts from Earth to space. *Nat Commun* **12**, 3553 (2021). <https://doi.org/10.1038/s41467-021-23740-6>.

[Roch17] D. Rochman, E. Bauge et al., *EPJ Nuclear Sci. Technol.* **3**, 14 (2017). <https://doi.org/10.1051/epjn/2017009>.

[Roch21] D. Rochman, E. Bauge, *EPJ Nuclear Sci. Technol.* **7**, 5 (2021). <https://doi.org/10.1051/epjn/2021005>.

[Roi14] O. Roig et al., *Nucl. Data Sheets* **113**, 165 (2014).

[Roi16] O. Roig et al., *Phys. Rev. C* **93**, 034602 (2016). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.034602>.

[Rus20] G. Rusev et al., *Proceedings of FPY 2019, EPJ Web of Conf.* **242**, 01007 (2020). <https://doi.org/10.1051/epjconf/202024201007>.

[Rus21] G. Rusev et al., *Proceedings of CNR*18, Springer Proceedings in Physics* **vol. 254**, 323 (2021).

[Sa20] R. Pérez Sánchez et al. *Phys. Rev. Lett.* **125**, 122502 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.122502>

[Sca22] Scaringella-Guerritat Y., Lee, K. S. et al. in preparation (2022).

[Sch22] N. Schunck, D. Regnier, Theory of nuclear fission, *Progress, Part. and Nucl. Phys.* **103963** (2022). <https://doi.org/10.1016/j.ppnp.2022.103963>.

[Sol16] Sollier A., Bouyer V., Hébert P. et al., “A novel method for the measurement of the von Neumann spike in detonating high explosives”, *J. Appl. Phys.*, **119**, 245902 (2016). <https://doi.org/10.1063/1.4955075>.

[Sol22] Sollier A., Hébert P. and Letremy R., “Chemical reaction zone measurements in pressed trinitrotoluene (TNT) and comparison with triaminotrinitrobenzene (TATB)”, *J. Appl. Phys.*, **131**, 055902 (2022). <https://doi.org/10.1063/5.0077906>

[Sou19] R. Soufli, F. Delmotte, J. Meyer-Ilse, F. Salmassi, N. Brejnholt, S. Massahi, D. Girou, F. Christensen, E. M. Gullikson, *J. Appl. Phys.* **125**, 085106 (2019).

[Tai16] J. Taieb, B. Laurent, G. Bélier, A. Sardet, C. Varignon, A new fission chamber dedicated to Prompt Fission Neutron Spectra measurements, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, **Volume 833**, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.06.137>.

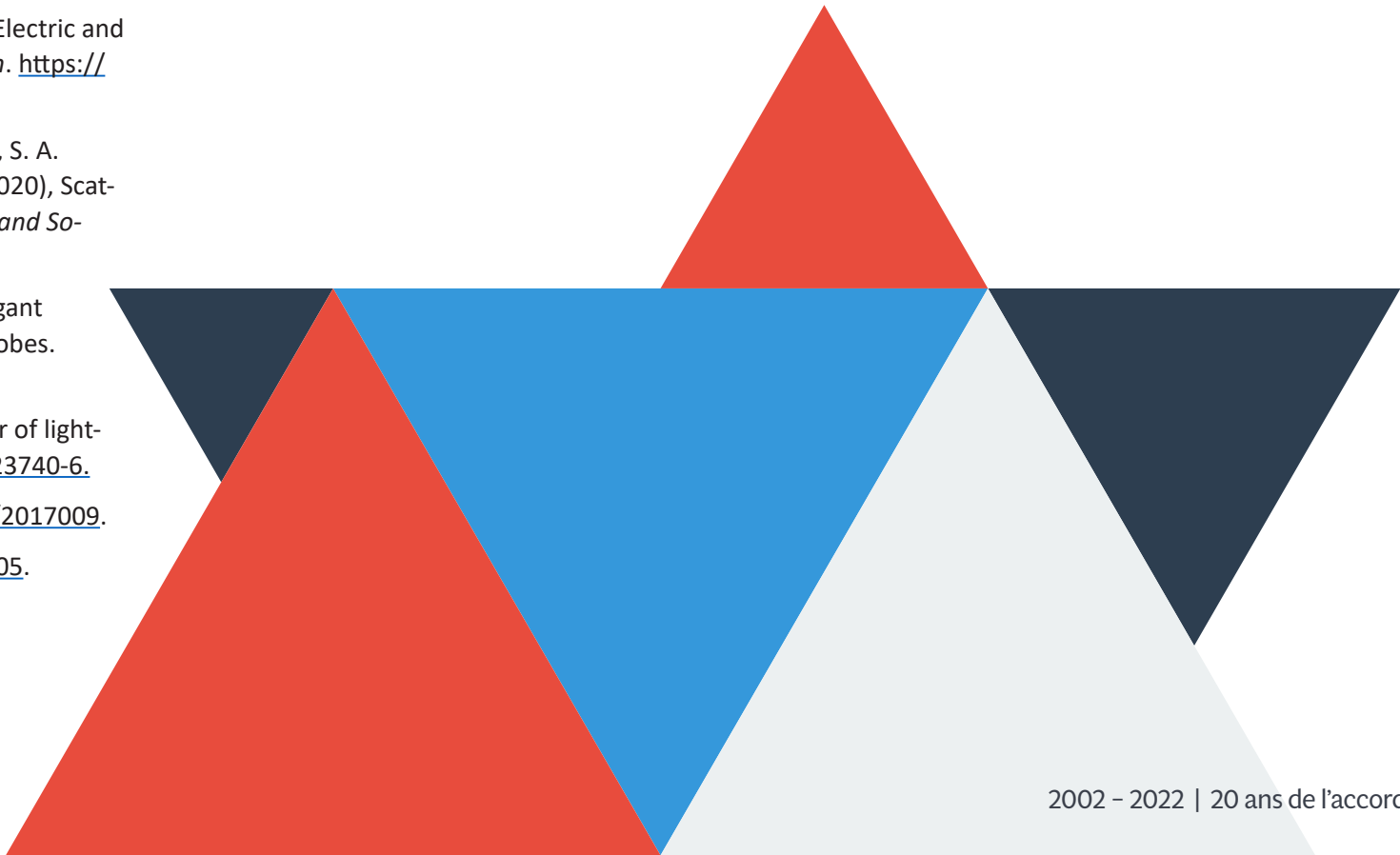
[Tal20] Talley S. et al., *Compos Sci Technol*, **198**, 108258 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2020.108258>.

[Tay09] W. A. Taylor et al., *J. Rad. Nucl. Chem.* **282**, 391 (2009). <https://doi.org/10.1007/s10967-009-0278-1>.

[Tay13] W. A. Taylor et al., *J. Rad. Nucl. Chem.* **296**, 689 (2013).

[Ver20] M. Verriere, D. Regnier, The Time-Dependent Generator Coordinate Method in Nuclear Physics Front. In *Phys.* **8** (2020). <https://doi.org/10.1007/s10967-012-2078-2>.

[Ver21] M. Verriere, N. Schunck, D. Regnier, Microscopic calculation of fission product yields with particle-number projection, *Phys. Rev. C* **203** (2021). <https://doi.org/10.1103/PhysRevC.103.054602>.



Acknowledgements / Remerciements

The work presented here within is only possible due to the dedicated scientists and staff in France and the United States of America. Their achievements over the past 10 years highlight their outstanding technical skills and abilities as world class scientists. Enabling this research are multiple premier research facilities and support staff in both countries. The accomplishments of the past decade have been exceptional and we all look forward to the next 10 years of a strong and vibrant collaboration between France and the U.S.

Le travail présenté dans ce document est le fruit des efforts conjugués de scientifiques et de techniciens passionnés en France et aux États-Unis. Leurs réussites au cours des dix dernières années démontrent que leurs compétences et leurs capacités techniques exceptionnelles sont au meilleur niveau de la recherche internationale. Ces travaux profitent pleinement de plusieurs installations de recherche de premier plan et du soutien constant des équipes engagées dans les deux pays. Si les réalisations de la dernière décennie ont été remarquables, elles sont surtout le gage pour les dix prochaines années d’une collaboration toujours forte et dynamique entre la France et les États-Unis.

Steering Committee of the Agreement / Comité de pilotage de l’Accord

Laurence Bonnet – CEA	Mike Kreisler - NNSA
Catherine Cherfils – CEA	Olivier Vacus - CEA
Njema Frazier - NNSA	

Coordinateurs techniques de laboratoire pour l’accord / Laboratory Technical Coordinators for the Agreement

James Colgan – LANL	Thomas Mattsson – SNL
Paul Dotson – LANL	David Riz – CEA
Jason T. Harke – LLNL	Cyrille de Saint Jean - CEA

Our thanks to the team that provided editorial, design and web support for this publication / Nos remerciements à l’équipe qui a fourni le support éditorial, de conception et web pour cette publication

Editors

Jason T. Harke – LLNL	David Riz – CEA
-----------------------	-----------------

Graphic Designer

A. Diaz (lead) – LLNL

Web Designers

J. Barrett – LLNL	M. Regynski- LLNL
D. Fenstermacher- LLNL	A. Simpson- LLNL
K. Paschal- LLNL	P. Williams- LLNL
G. Pinkela- LLNL	C. Willis-Chun- LLNL



