

UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

# HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

spécialité « Physique Nucléaire »

SPALLATION :  
COMPRENDRE *pour* PRÉDIRE !?

**Jean-Christophe DAVID**

HDR soutenue le 13 décembre 2012 devant le jury composé de :

M. CHRISTIAN BECK	Université de Strasbourg	(Directeur)
M. YORICK BLUMENFELD	IPN d'Orsay	(Rapporteur)
M. ALAIN BOUDARD	CEA Saclay	(Examineur)
M. JOSEPH CUGNON	Université de Liège	(Examineur)
M. CHEIKH DIOP	CEA Saclay	(Rapporteur)
M. JOSE MANUEL QUESADA MOLINA	Universidad de Sevilla	(Rapporteur)





# TABLE DES MATIÈRES

TABLE DES MATIÈRES	iv
LISTE DES FIGURES	v
LISTE DES TABLEAUX	xvii
INTRODUCTION	1
1 RÉACTION DE SPALLATION, MODÉLISATIONS ET CODES ASSOCIÉS	3
1.1 LES RÉACTIONS DE SPALLATION - GÉNÉRALITÉS	3
1.1.1 Caractéristiques	4
1.1.2 Pourquoi sont-elles étudiées ?	5
1.1.3 Mesures expérimentales	7
1.2 MODÉLISATION	11
1.2.1 Première étape : les réactions directes (phase rapide)	12
1.2.2 Seconde étape : la désexcitation (phase lente)	19
1.3 LA CASCADE INTRANUCLÉAIRE DE LIÈGE : INCL	27
1.3.1 Préparation de la cible	27
1.3.2 Préparation du projectile	28
1.3.3 Propagation	28
1.3.4 Avatars	28
1.3.5 Blocage de Pauli	30
1.3.6 Fin de la cascade	31
1.3.7 Autres améliorations dans INCL4.5	32
1.4 LE MODÈLE DE DÉSEXCITATION DE GSI : ABLA	33
1.4.1 Évaporation	34
1.4.2 Fission	40
1.4.3 Multifragmentation	42
1.5 UTILISATION DANS UN CODE DE TRANSPORT	43
1.5.1 LAHET3.16 - MCNPX2.5.0	46
1.5.2 MCNPX2.7-MCNP6	49
1.5.3 Autres codes de transport de particules	50
CONCLUSION	51
2 VALIDATION DES MODÈLES	53
2.1 HISTOIRES DE VALIDATIONS	53
2.2 CIBLES MINCES - LA RÉACTION DE SPALLATION	
EXEMPLE D'UN TEST GÉNÉRAL : <i>Benchmark of spallation models</i>	57
2.2.1 Mise en place	58
2.2.2 Résultats - Analyses	61
2.2.3 Conclusions	77

2.3	CIBLES ÉPAISSES - RÉACTIONS DE SPALLATION EN CASCADE . . . . .	78
2.3.1	Neutrons . . . . .	79
2.3.2	Noyaux résiduels . . . . .	80
	CONCLUSION . . . . .	90
<b>3</b>	<b>LA MODÉLISATION, UN MOYEN D'ACTION</b>	<b>91</b>
3.1	BASE DE DONNÉES . . . . .	91
3.1.1	Protonthérapie . . . . .	91
3.1.2	Activation . . . . .	94
3.1.3	Cosmogénie . . . . .	99
3.2	SIMULATION - CONCEPTION . . . . .	103
3.2.1	Eurisol . . . . .	103
3.2.2	Megapie . . . . .	111
3.2.3	ESS . . . . .	117
	CONCLUSION . . . . .	121
<b>4</b>	<b>PERSPECTIVES ET RÉFLEXIONS</b>	<b>123</b>
4.1	AU-DELÀ DES DONNÉES OU <i>Thinck beyond</i> ... . . . .	123
4.2	LA SPALLATION DANS L'ESPACE . . . . .	125
4.3	UNE AUTRE DIMENSION : ÉTRANGETÉ ET HYPERNOYAU . . . . .	127
	CONCLUSION . . . . .	134
	CONCLUSION GÉNÉRALE	<b>135</b>
<b>A</b>	<b>ANNEXES</b>	<b>137</b>
A.1	QUELQUES FIGURES DU CHAPITRE 2. . . . .	138
A.2	PROGRAMME DU <i>Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions</i> . . . . .	161
A.3	EXEMPLES DE CONCLUSION DE PARTICIPANTS AU WORKSHOP <i>Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions</i> . . . . .	163
A.4	ÉVOLUTION DES PERFORMANCES DES SOURCES DE NEUTRONS. . . . .	165
	BIBLIOGRAPHIE	<b>167</b>

## LISTE DES FIGURES

1.1	Nombre de publications dans Elsevier et PROLA ( <i>Physical Review Online Archive</i> ) ayant le mot spallation dans le titre ou le résumé depuis 1948. . . . .	4
1.2	Les expériences publiées sur la production de neutron en cibles épaisses. Tiré de (Filges et Goldenbaum 2010) . . . . .	8

1.3	Variation de paramètres physiques avec l'énergie du proton incident pour une collision centrale sur un noyau de $^{208}\text{Pb}$ . $\lambda$ et $\Lambda$ sont expliqués dans le texte, $1/\rho\sigma$ représente $\Lambda$ si le principe de Pauli n'était pas appliqué ( $\rho$ étant la densité de nucléons au centre du noyau et $\sigma$ la section efficace moyenne proton-nucléon), $\xi = \Lambda/\lambda/10$ et enfin $\Lambda/3\beta$ représente le rapport entre la durée d'une interaction et le temps entre deux interactions (il doit être strictement supérieur à 1). Figure tirée de (Yariv et al. 2008) . . .	17
1.4	Schématisation du principe de la balance détaillée avec $\rho_1$ la densité d'état dans l'état initial (noyau), $P_{12}$ la probabilité d'émettre une particule, $\rho_2$ la densité d'état dans l'état final (noyau+particule) et $P_{21}$ la probabilité de capturer une particule .	20
1.5	Evolution en fonction du temps de trois observables de la cascade intranucléaire. A gauche l'énergie d'excitation du noyau, au milieu l'énergie cinétique moyenne de la particule émise et à droite l'asymétrie de moment des participants. Ces figures sont tirées de (Boudard et al. 2002). . . . .	31
1.6	Illustration de différents effets sur la section efficace de réaction en fonction de l'énergie du projectile. La réaction étudiée est p+Pb et les données expérimentales sont tirées de (Barashenkov 1993, Prael et Chadwick 1997, Carlson 1996). La courbe noire en tirets représente INCL4.2. Les courbes rouges sont issues de INCL4.5, sachant que la courbe en tirets ne prend pas en compte la déflexion coulombienne, celle en pointillés ne prend pas en compte le critère de <i>Local Energy</i> et la courbe en trait plein est la version complète de INCL4.5. . . . .	33
1.7	Vue synthétique des différentes voies possibles de désexcitation d'un noyau excité dans Abl07. Les différents processus sont la multifragmentation (marron), l'évaporation de particules légères, du nucléon à l' $\alpha$ , $\gamma$ compris (bleu), l'évaporation de noyau de masse intermédiaire, noté ici fragmentation (jaune) et la fission (rouge). IMF et HP correspondent respectivement à <i>Intermediate Mass Fragment</i> et <i>Heavy Partner</i> et PF correspond à Produit de Fission. Les noyaux considérés comme résultats finals de la désexcitation sont indiqués sur fond noir. . . . .	35
1.8	Comparaison des largeurs de production de $^{16}\text{O}$ , à partir de quatre noyaux émetteurs, obtenues par la méthode prenant en compte les densités d'état des deux noyaux ( $^{16}\text{O}$ et son partenaire), $\Gamma_2$ , et la méthode utilisant l'approximation d'un seul système, $\Gamma_1$ . Figure tirée de (Kelic et al. 2008). . . . .	39
1.9	Energie potentielle à la barrière de fission pour $^{238}\text{U}$ en fonction de l'asymétrie de masse exprimée par le nombre de neutrons de l'un des fragments préformés. Figure de base tirée de (Benlliure et al. 1998). Les couleurs des flèches correspondent à celles des contributions de l'éq. 1.34 . . . . .	42
1.10	Système de codes CALOR (Fu et Gabriel 1998) développé à Oak Ridge pour aider les expérimentateurs à la conception de calorimètres, d'où son nom. Il comprend notamment le code HETC pour la haute énergie et le code MORSE pour la basse énergie. Figure tirée de (Fu et Gabriel 1998) . . . . .	45

1.11	Système de codes LCS (LAHET Code System) (Prael 1989) développé à Los Alamos. Il comprend notamment le code LAHET pour la haute énergie et le code HMCNP pour la basse énergie. Figure tirée de (Prael 1989) . . . . .	45
1.12	Spectres de neutrons obtenus à SATURNE par un faisceau de proton de 1.6 GeV sur un cylindre de fer de diamètre 20 cm et de longueur 105 cm. La partie vue par le détecteur est donnée pour chaque angle à droite de la figure. Calculs faits avec INCL4.2-Abla (rouge) et Bertini-Dresner-RAL (bleu) dans LAHET3.16. Figure tirée de (David et al. 2003) . . . . .	47
1.13	Calculs faits avec LAHET3.16 de concentrations en appm (Atomic Parts Per Million) des différentes impuretés chimiques produites par spallation dans une cible de Pb-Bi après un an d'irradiation. INCL4.2-ABLA (pointillé), Bertini-Dresner-RAL (pointillé-tiret) et le rapport entre les deux calculs (plein). Figure tirée de (Donadille et al. 2003) . . . . .	47
2.1	Sections efficaces doublement différentielles de production de tritium dans la réaction $p + Ta$ à 1.2 GeV. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07 (courbe pleine) et de INCL4.5 seul (courbe tiretée). Des facteurs multiplicatifs différents ont été affectés aux différents angles pour des raisons de clarté. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010). . . . .	55
2.2	Sections efficaces de production d' $^3He$ (courbes bleues) et $\alpha$ (courbes rouges) par des protons sur le fer. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et (Ammon et al. 2008), et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07. Les courbes pleines représentent le résultat total, les courbes tiretées la contribution d'INCL4.5 et les courbes point-tiret la contribution d'Abla07. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010). . . . .	55
2.3	De gauche à droite les rapports calcul/mesure pour des spectres en angle et énergie de neutrons, protons et $\alpha$ aux alentours de $30^\circ$ . Les cibles et les énergies de projectiles sont différentes pour des raisons de disponibilités de données expérimentales. Ces figures sont tirées de (Rapp et al. 2006). . . . .	56
2.4	Les rapports calcul/mesure pour la distribution en masse des noyaux résiduels produits par la réaction $^{56}Fe(1A.GeV) + p$ . Cette figure est tirée de (David et al. 2007a). . . . .	56
2.5	Liste des spectres de particules expérimentaux utilisés pour le <i>benchmark</i> . De gauche à droite : les neutrons, les particules légères chargées et les pions. Cette figure est tirée du site web AIEA <a href="http://www-nds.iaea.org/spallations/">http://www-nds.iaea.org/spallations/</a> . . . . .	59
2.6	Liste des distributions de multiplicités et multiplicités moyennes de neutrons expérimentales utilisées pour le <i>benchmark</i> . Cette figure est tirée du site web AIEA. . . . .	59
2.7	Liste des données expérimentales sur les noyaux résiduels utilisés pour le <i>benchmark</i> . À gauche les distributions isotopiques, desquelles on tire les distributions en masses et en charges, et à droite les fonctions d'excitation. Cette figure est tirée du site web AIEA. . . . .	59

2.8	Liste des participants et des calculs fournis suivant les observables. La couleur verte indique que les calculs ont été fournis pour l'observable et la couleur rouge qu'ils n'ont pas été fournis. Cette figure est tirée du site web AIEA <a href="http://www-nds.iaea.org/spallations/">http://www-nds.iaea.org/spallations/</a> .	60
2.9	Exemple de tableau du site web AIEA ( <a href="#">Benchmark of Spallation Models</a> ) permettant d'accéder aux résultats de tous les participants. Le tableau ici est celui relatif aux sections efficaces doublement différentielles de production de neutrons. Le lien <a href="#">[Fig.]</a> permet d'accéder aux figures comparant calcul et données expérimentales, le lien <a href="#">[data]</a> au fichier ASCII des résultats de calcul et le lien <a href="#">[FoM]</a> aux figures des <i>FoM</i> .	63
2.10	Distributions en masses obtenues par les modèles. En haut avec le fer (gauche : 300.A MeV ; droite : 1000.A MeV). Au milieu avec le plomb (gauche : 500.A MeV ; droite : 1000.A MeV). En bas avec l'uranium à 1000.A MeV.	64
2.11	Notes obtenues par les modèles pour les distributions en masses et en charges mesurées en cinématiques inverses avec du fer (300 et 1000.A MeV), du plomb (500 et 1000.A MeV) et de l'uranium (1000.A MeV).	65
2.12	Notes obtenues par les modèles pour les distributions isotopiques mesurées en cinématiques inverses avec du fer (300 et 1000.A MeV), du plomb (500 et 1000.A MeV) et de l'uranium (1000.A MeV).	66
2.13	Distributions en masses de l'isotope Argon dans les réactions Fe+p à 300.A MeV (gauche) et 1000.A MeV (droite) par tous les modèles.	66
2.14	Fonctions d'excitation du $^{24}\text{Na}$ pour les réactions p+Fe (gauche) et p+Pb (droite).	67
2.15	Notes obtenues par les modèles pour les spectres doublement différentiels de protons, deutons et tritons dans la réaction n (542 MeV) + Bi (en haut) et les spectres doublement différentiels de protons, deutons, tritons, $^3\text{He}$ et $\alpha$ dans la réaction p (2500 MeV) + Au (en bas).	69
2.16	Les meilleurs et pires résultats obtenus globalement par les modèles pour l'émission de particules légères chargées. A gauche, le pire cas avec les spectres doublement différentiels d' $^3\text{He}$ dans la réaction p (62 MeV) + $^{56}\text{Fe}$ , et à droite le meilleur cas avec les spectres doublement différentiels de proton dans la réaction p (175 MeV) + Ni.	70
2.17	Spectres doublement différentiels de pions. A gauche, production de $\pi^+$ à $15^\circ$ dans la réaction p(730MeV)+Pb et, à droite, production de $\pi^-$ à $84^\circ$ dans la réaction p(2205MeV)+Al.	71
2.18	Notes moyennes obtenues par les modèles pour les spectres doublement différentiels de production de neutrons. Le système de notation est le même que celui préconisé par R. Michel (page 62, tableau 2.1)	71
2.19	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à $120^\circ$ dans la réaction p(800MeV)+Fe. Focalisation sur la partie basse énergie.	72

2.20	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à 85° dans la réaction p(1600MeV)+Fe. Focalisation sur la partie énergie intermédiaire (20-150 MeV). . . . .	73
2.21	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles (24° à gauche, 80° au centre et 120° à droite) dans la réaction p(63MeV)+Pb. Les figures du haut concernent les modèles incorporant une phase de <i>pré-équilibre</i> et les figures du bas les modèles n'incorporant pas une phase de <i>pré-équilibre</i> . . . . .	73
2.22	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles avant (0° à gauche, 10° au centre et 25° à droite) dans la réaction p(1200MeV)+Fe. Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150$ MeV). . . . .	74
2.23	Distributions angulaires du facteur de déviation (ou <i>FoM</i> ) M (décrit page 87) pour les réaction p(800MeV)+Fe et p(1600MeV)+Pb. Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150$ MeV). . . . .	75
2.24	Spectres doublement différentiels de production de neutrons aux angles arrières. À 150° dans la réaction p(800MeV)+Fe (à gauche) et 160° dans la réaction p(1600MeV)+Pb (à droite) . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150$ MeV). . . . .	75
2.25	Multiplicités moyennes de neutrons. À gauche, pour des neutrons de basses énergies (entre 2 et 20 MeV) dans les réactions p(800 MeV)+Fe, p(1200 MeV)+Fe et p(1600 MeV)+Fe et, à droite, pour des neutrons de hautes énergies ( $\geq 20$ MeV) dans les réaction p(800 MeV)+Pb, p(1200 MeV)+Pb et p(1600 MeV)+Pb. . . . .	76
2.26	Distribution de multiplicités de neutrons dans la réaction p(1200 MeV)+Pb. . . . .	76
2.27	Schéma de l'installation utilisée pour les mesures de spectres de neutrons sortant de cibles épaisses à SATURNE. . . . .	80
2.28	Spectres de neutrons produits en cibles épaisses à SATURNE. En haut les deux graphes concernent la même expérience p(800 MeV)+Fe, alors que les graphes du bas les expériences p(1,6 GeV)+Fe (gauche) et p(1,6 GeV)+W (droite). Les caractéristiques des expériences sont indiquées sur les graphes ( $\Phi$ : diamètre ; L : longueur ; pos : position ; zones vues par les détecteurs données pour chaque angle à droite des graphes (bleu foncé (zone vue totalement) - bleu clair (zone vue partiellement))). Les modèles présentés sont indiqués sur les différents graphes. . . . .	81
2.29	Spectres de neutrons en cibles minces. A gauche, résultats des modèles INCL4.2-Abla (rouge) et INCL4.5-Abla07 (vert) pour la réaction p(800 MeV)+Fe (figure tirée du rapport de stage de S. Taylor (Taylor 2010) et, à droite, résultats du modèle Bertini-Dresner pour la réaction p(1600 MeV)+Fe. . . . .	82
2.30	Distributions en masse du Ne obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0. . . . .	83

2.31	Distributions en masse du Kr obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies( $E \leq 20$ MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum) ). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.	84
2.32	Distributions en masse du Xe obtenues avec une cible épaisse de ThCx bombardée par des protons de 1,0 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies( $E \leq 20$ MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum) ). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.	84
2.33	Schéma de la cible de Plomb utilisée dans l'expérience faite à Dubna. Figure tirée de (Pohorecki et al. 2007).	85
2.34	Résultats cumulatifs des rapports calcul/mesure pour les activités des radionucléides dans la cible entière, prenant en compte les temps d'irradiation et de refroidissement (Janczyszyn et al. 2011). Les chiffres devant les noms des modèles correspondent à un participant donné (exemple : CEA-Saclay = 3).	86
2.35	Valeurs du facteurs $H$ pour les modèles et les isotopes* [ref - J. Janczyszyn et al., "Benchmark on radionuclides production and heat generation rates in lead target exposed to 660 MeV protons"- AGH Faculty of Energy and Fuels - AGH - University of Science and Technology (Krakow 2011)].	87
2.36	Distribution axiale de l'activité spécifique du $^{88}\text{Y}$ dans la cible de plomb décrite dans cette section. Les versions des modèles utilisés sont celles implantées dans le code de transport MCNPX2.5.0. Les données sont celles de l'expérience (Janczyszyn et al. 2011).	88
2.37	Rapports Calcul/Mesure des activités pour les noyaux dont les calculs ont fourni une production significative (plus de 100 noyaux). Pour chaque isotope (masse croissante de la gauche ( $^{83}\text{Rb}$ ) vers la droite ( $^{207}\text{Bi}$ )) le trait représente la gamme de ces rapports le long de la cible. Pour le $^{207}\text{Bi}$ on a séparé le pic de Bragg dont la position est souvent délicate à reproduire. Les versions des modèles utilisés sont celles implantées dans le code de transport MCNPX2.5.0.	89
2.38	Fonctions d'excitations dans une cible de plomb naturel bombardée par des protons. À gauche l'isotope $^{88}\text{Y}$ et à droite l'isotope $^{173}\text{Lu}$ . Dans le cas du $^{173}\text{Lu}$ la production est cumulative, prenant en compte les ascendants. Les techniques d'extraction de ces productions cumulatives étant différentes suivant les expériences les résultats de calcul ont donc été obtenus différemment suivant l'expérience (rouge : Michel01 - cm ; bleu : Titarenko - ct). Ce point technique est abordé au chapitre 3, page 95.	89

3.1	Exemples de sections efficaces de production d'isotopes en fonction de l'énergie du proton incident sur des cibles de $^{40}\text{Ca}$ (à gauche), de $^{16}\text{O}$ (au centre) et de $^{12}\text{C}$ (à droite). INCL correspond à la combinaison INCL4.6-Abla07, TALYS <sub>old</sub> à la version standard de TALYS1.4, TALYS <sub>new</sub> à des résultats de TALYS1.4 où B. Braunn a ajusté certains paramètres (cf. note de bas de page 1, page 93) et ICRU une base de donnée. . . . .	93
3.2	Vue schématique des différents codes utilisés pour construire la bibliothèque JENDL haute énergie. Figure tirée de (Watanabe et al. 2011). . . . .	94
3.3	Liste non exhaustive de bibliothèques de données nucléaires notamment de hautes énergies (> 150 MeV), tirée de (Korovin et al. 2010). . . . .	95
3.4	Sections efficaces mesurées (carrés) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne) pour la production de $^{129}\text{I}$ par irradiation de bismuth avec des protons. Figure tirée de (Schumann et al. 2011). . . . .	96
3.5	Sections efficaces mesurées (carrés) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne) pour la production de $^{36}\text{Cl}$ (gauche) et $^{26}\text{Al}$ (droite) par irradiation de bismuth avec des protons. Figure tirée de (Schumann et al. 2011). . . . .	97
3.6	Sections efficaces mesurées (carrés pour les cibles de plomb et ronds pour les cibles de bismuth) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne grise pour le plomb et noire pour le bismuth) pour la production de $^{21}\text{Ne}$ (gauche) et $^{38}\text{Ar}$ (droite) par irradiation avec des protons. Figure tirée de (Leya et al. 2008). . . . .	97
3.7	Sections efficaces mesurées (rond) et calculées par INCL4.2-Abla et INCL4.5-Abla07 pour la production de $^{26}\text{Al}$ (gauche) et $^{36}\text{Cl}$ (droite) par irradiation d'une cible de bismuth avec des protons. Les calculs ont été faits avec une cible de plomb. . . . .	98
3.8	Sections efficaces mesurées (rond) et calculées par INCL4.2-Abla et INCL4.5-Abla07 pour la production de $^{21}\text{Ne}$ (gauche) et $^{38}\text{Ar}$ (droite) par irradiation d'une cible de plomb avec des protons. . .	98
3.9	Spectres en énergie des protons GCR à 1 UA. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs pour le paramètre de modulation solaire M. Cette figure est tirée de (Leya et al. 2001). .	99
3.10	Sections efficaces de production sur le fer de $^{10}\text{Be}$ (en haut à gauche), de $^{21}\text{Ne}$ (en haut à droite), de $^{36}\text{Cl}$ (en bas à gauche) et de $^{54}\text{Mn}$ (en bas à droite) en fonction de l'énergie du proton incident. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla (bleu), INCL4.5-Abla07 (rouge), Bertini-Dresner (kaki) et TALYS (bibliothèque TENDL10) (violet). . . . .	100
3.11	Sections efficaces de production sur le fer de $^{38}\text{Ar}$ (à gauche) et de $^{54}\text{Mn}$ (à droite) en fonction de l'énergie du proton ou du neutron incident. Les calculs sont faits avec INCL4.5-Abla07 (rouge) et TALYS (bibliothèque TENDL10) (violet). Les traits pleins concernent les protons et les traits tiretés les neutrons. . . . .	101

3.12	Sections efficaces de production de $^{51}\text{Cr}$ (à gauche) et de $^{57}\text{Co}$ (à droite) en fonction de l'énergie de l' $\alpha$ incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (rouge). Les résultats tirés de l'approximation de la brisure de l' $\alpha$ en deux protons et deux neutrons sont donnés par INCL4.6-Abla07 (bleu). . . . .	102
3.13	Vue schématique de l'installation EURISOL envisagée. Figure tirée de (Cornell et al. 2009). . . . .	103
3.14	Les différentes géométries de la cible de fission (cible de mercure entourée des cibles d'actinides), chronologiquement de gauche à droite et de haut en bas. Figure tirée de (Cornell et al. (2009), p. 47 et 62). . . . .	104
3.15	Estimations des activités (totales et des principaux contributeurs) dans la cible de mercure en fonction du temps de refroidissement et après une irradiation de 40 ans en continu avec des protons de 1 GeV et une intensité de 2.28 mA. Les calculs ont été faits avec trois modèles de spallation différents disponibles dans MCNPX2.5.0 et un code d'évolution, CINDER'90. Les trois modèles sont Isabel-Abla (ligne pleine), CEM2k (ligne tiretée) et INCL4.2-Abla (ligne tiretée-pointillée). Figure tiré de (Rapp et al. 2010). . . . .	105
3.16	Sections efficaces de production du $^{203}\text{Hg}$ (gauche), du $^{147}\text{Gd}$ (milieu) et du $^{149}\text{Gd}$ (droite) en fonction de l'énergie du proton incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (ligne rouge). . . . .	105
3.17	Contributions à l'activité (en GBq) de quelques isotopes importants pour la radioprotection de la cible de mercure. Estimations fournies par trois modèles disponibles dans MCNPX2.5.0 : Isabel-Abla, CEM2k et INCL4.2-Abla . Tableau tiré de (Rapp et al. 2010). . . . .	106
3.18	Paramètres utilisés pour le calcul de rendements de production en cible des noyaux dans le cas des cibles directes. La densité $\rho$ est en $\text{g.cm}^{-3}$ , la longueur L en cm, le rayon R et la largeur à mi-hauteur $\sigma$ de l'extension du faisceau en mm, l'énergie E en GeV et la puissance P en kW. Ce tableau est tirée de (Chabod et al. 2010). . . . .	107
3.19	Distributions en charge des taux de production de noyaux par proton incident. Les différentes cibles ont été choisies de masses comparables et le modèle utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2010). . . . .	108
3.20	Matériaux optimaux pour la production en cible de noyaux radioactifs. Les caractéristiques géométriques prises en compte pour cette étude étaient : Rayon R=18mm, masse = 2kg. Ce tableau est tiré de (Chabod et al. 2010). . . . .	108
3.21	Taux de production par proton incident et par GeV de $^7\text{Be}$ , obtenus par différentes énergies de faisceaux de protons sur différentes cibles (R = 18 mm). Le code utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2008). . . . .	108
3.22	Taux de production de $^{92}\text{Kr}$ , obtenus par un faisceau de protons de 0,5 GeV et une cible de $\text{UC}_3$ (gauche), et de $^{180}\text{Hg}$ , obtenus par un faisceau de protons de 1 GeV et une cible de Pb (droite), par proton incident ( $10^{-6} \text{ s}^{-1}$ ) en fonction du rayon R et de la longueur L de la cible. Le code utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2008). . . . .	109

3.23	Rendements de production optimaux des noyaux étudiés dans le cadre du projet EURISOL-DS pour les cibles directes. Ce tableau est tiré de (Chabod et al. 2008) et la légende a été conservée pour garder les différentes remarques. Les références données dans le tableau sont les suivantes : [6] (David et al. 2007a), [7] (David et al. 2007b) et [8] (Boudard et al. 2002). . . . .	110
3.24	Vues schématiques de la cible de spallation MEGAPIE. À gauche, les détails des composants de la cible, et à droite la géométrie utilisée dans le code de transport MCNPX2.5.0 avec la cible et les autres éléments de l'installation SINQ comme l'eau lourde. Figures tirées de (Zanini et al. 2008). . . . .	111
3.25	Activités en fonction du temps de refroidissement dans la cible LBE, le conteneur et la fenêtre de MEGAPIE. L'irradiation a duré 123 jours avec un faisceau de proton de 575 MeV à une intensité de 0,947 mA. Les activités totales sont en traits pleins et les activités sans la contribution des neutrons de basses énergies ( $\leq 20$ MeV) sont en tireté. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla. Figure tirée de (David et al. 2008). . . . .	112
3.26	Principaux contributeurs à l'activité de la cible LBE. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla (gauche) et Bertini-Dresner (droite). Autres détails, voir figure 3.25. Figures tirées de (David et al. 2008).	112
3.27	Rapports entre les activités mesurées dans le bac de récupération et les activités calculées dans la cible LBE en fonction de la masse A des isotopes. Les codes utilisés sont disponibles dans MCNPX2.5.0, sauf les codes FLUKA (Ferrari et al. 2005) et SNT (Korovin et al. 1992). Figure tirée de (Thiollière et al. 2011). . . . .	113
3.28	Activités totales en fonction du temps de refroidissement dans la cible LBE et la fenêtre de MEGAPIE. Pour la cible (gauche) quatre modèles sont représentés, INCL4.5-Abla07, INCL4.2-Abla, Bertini-Dresner et CEM03 (version MCNPX2.6), ainsi que les contributions du tritium. Pour la fenêtre (droite) deux modèles sont représentés, INCL4.5-Abla07 et INCL4.2-Abla, avec les principaux contributeurs. . . . .	114
3.29	Taux de production d'isotopes de l'astate dans une cible de plomb-bismuth liquide. Les données expérimentales (Tall et al. 2008) ont été fournies par A. Guertin (Subatech) et L. Zanini (ESS) et les calculs ont été faits avec INCL4.6-Abla07 implantés dans une version $\beta$ de MCNPX2.7 et en prenant en compte différents temps de relâchement. . . . .	116
3.30	Liste des isotopes les plus dangereux d'un point de vue radiologique. Les pourcentages sont les contributions de chacun d'après une première étude faite par D. Ene (ESS) (Ene 2011). Les fonds bleus indiquent les cas où les protons ne sont pas la voie principale pour la production de ces isotopes ou les cas des métastables, non fournis par nos codes. Les cadres rouges indiquent les isotopes pour lesquelles des données expérimentales existent. . . . .	117

3.31	Sections efficaces de production de quatre isotopes, le $^{148}\text{Gd}$ (en haut à gauche), le $^{186}\text{Re}$ (en haut à droite), le $^{182}\text{Ta}$ (en bas à gauche) et le $^{172}\text{Hf}$ (en bas à droite), en fonction de l'énergie du proton sur une cible de $^{nat}\text{W}$ . Les rapports entre les calculs et les mesures sont donnés en dessous de chaque graphe de sections efficaces. Figures tirées de (Leprince et al. 2012). . . . .	118
3.32	Sections efficaces de production du $^{186}\text{Re}$ en fonction de l'énergie du deuton sur une cible de $^{nat}\text{W}$ . Les rapports entre les calculs et les mesures sont donnés en dessous du graphe de sections efficaces.	119
3.33	Exemple de géométrie de la cible ESS modélisée dans MCNPX. .	120
3.34	Contributions des différentes particules à la production de $^{148}\text{Gd}$ en fonction de leur énergies. Calcul fait avec INCL4.6-Abla07 dans une version $\beta$ de MCNPX2.7. . . . .	120
4.1	Nombre de noyau de $^{95}\text{Zr}$ produits suivant la profondeur dans une cible de plomb décrite dans la section 2.3.2, page 85. Les points rouges sont les résultats de la mesure, les points bleus sont le résultat de la convolution des sections efficaces élémentaires mesurées par les spectres des particules calculés et les points noirs les résultats uniquement du calcul. Les lignes représentent les incertitudes associées. . . . .	124
4.2	Sections efficaces doublement différentielles de production d' $\alpha$ avec des neutrons incidents de 175 MeV sur une cible de Bismuth. Les calculs sont faits avec INCL4.5-Abla07 et les données ont été ou non corrigées de l'épaisseur de la cible. Pour les détails voir la légende. À gauche les premiers résultats et à droite après correction de l'erreur dans la déconvolution de l'épaisseur de la cible. . . . .	127
4.3	Sections efficaces de production sur le fer de $^{51}\text{Cr}$ (en haut à gauche), de $^{57}\text{Co}$ (en haut à droite), de $^{57}\text{Ni}$ (en bas à gauche) et de $^{59}\text{Ni}$ (en bas à droite) en fonction de l'énergie de l' $\alpha$ incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (rouge plein) et INCL4.5-Abla07 (rouge pointillé-tiré). Les résultats tirés de l'approximation de la brisure de l' $\alpha$ en deux protons et deux neutrons sont donnés par INCL4.6-Abla07 (bleu). . . . .	128
4.4	Comparaison des sections efficaces totales $\text{K}^{\pm}+^{12}\text{C}$ , divisées par 12, avec celles de $\text{K}^{\pm}\text{N}$ . Cette figure est tirée de (Dover et Moffa 1977). . . . .	130
4.5	Multiplicités des particules et les différentes contributions pour la réaction $\bar{p}(4 \text{ GeV}/c)+^{181}\text{Ta}$ . Ce tableau est tiré de (Cugnon et al. 1990). . . . .	131
4.6	Spectres de $\text{K}^+$ calculés pour la réaction $p+^{208}\text{Pb}$ à 2.1 GeV avec les données expérimentales de (Schnetzer et al. 1989). Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de la section efficace élastique $\text{K}^+\text{N}$ : pointillée (0 mb), pleine (10 mb) et tirée (20 mb). Cette figure est tirée de (Rudy 1999). . . . .	132

4.7	Représentation schématique des contributions des différents processus dans les réactions p+Au, p+Bi et p+U à 1.9 GeV. Les valeurs sont celles obtenues par le code de calcul. Le paramètre $P_s$ correspond à la probabilité de survie à la fission prompte et le paramètre $P_{f\Lambda}$ à la probabilité de fission par décroissance non-mésonique. Cette figure est tirée de (Rudy 1999). . . . .	132
4.8	Les différentes installations dans le monde où se font ou se feront les études sur les hypernoyaux. Cette figure est tirée d'une présentation de Take R. Saito, de la collaboration HypHI, lors de " <i>The HypHI project at GSI</i> ", IX International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics HYP2006, University of Mainz, Mainz, Germany, October 10th-14th, 2006. . . . .	133
A.1	Sections efficaces doublement différentielles de production de tritium dans la réaction p + Ta à 1.2 GeV. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07 (courbe pleine) et de INCL4.5 seul (courbe tiretée). Des facteurs multiplicatifs différents ont été affectés aux différents angles pour des raisons de clarté. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010). . . . .	139
A.2	Sections efficaces de production d' $^3He$ (courbes bleues) et $\alpha$ (courbes rouges) par des protons sur le fer. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et (Ammon et al. 2008), et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07. Les courbes pleines représentent le résultat total, les courbes tiretées la contribution d'INCL4.5 et les courbes point-tiret la contribution d'Abla07. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010). . . . .	140
A.3	De gauche à droite les rapports calcul/mesure pour des spectres en angle et énergie de neutrons, protons et $\alpha$ aux alentours de $30^\circ$ . Les cibles et les énergies de projectiles sont différentes pour des raisons de disponibilités de données expérimentales. Ces figures sont tirées de (Rapp et al. 2006). . . . .	141
A.4	Les rapports calcul/mesure pour la distribution en masse des noyaux résiduels produits par la réaction $^{56}Fe(1A.GeV) + p$ . Cette figure est tirée de (David et al. 2007a). . . . .	142
A.5	Liste des participants et des calculs fournis suivant les observables. La couleur verte indique que les calculs ont été fournis pour l'observable et la couleur rouge qu'ils n'ont pas été fournis. Cette figure est tirée du site web AIEA <a href="http://www-nds.iaea.org/spallations/">http://www-nds.iaea.org/spallations/</a> . . . . .	143
A.6	Distributions en masses obtenues par les modèles. En haut avec le fer (gauche : 300.A MeV ; droite : 1000.A MeV). Au milieu avec le plomb (gauche : 500.A MeV ; droite : 1000.A MeV). En bas avec l'uranium à 1000.A MeV . . . . .	144
A.7	Distributions en masses de l'isotope Argon dans les réactions Fe+p à 300.A MeV (gauche) et 1000.A MeV (droite) par tous les modèles. . . . .	145
A.8	Fonctions d'excitation du $^{24}Na$ pour les réactions p+Fe (gauche) et p+Pb (droite). . . . .	146

A.9	Les meilleurs et pires résultats obtenus globalement par les modèles pour l'émission de particules légères chargées. A gauche, le pire cas avec les spectres doublement différentiels d' $^3\text{He}$ dans la réaction $p(62\text{ MeV}) + ^{56}\text{Fe}$ , et à droite le meilleur cas avec les spectres doublement différentiels de proton dans la réaction $p(175\text{ MeV}) + \text{Ni}$ . . . . .	147
A.10	Spectres doublement différentiels de pions. A gauche, production de $\pi^+$ à $15^\circ$ dans la réaction $p(730\text{MeV})+\text{Pb}$ et, à droite, production de $\pi^-$ à $84^\circ$ dans la réaction $p(2205\text{MeV})+\text{Al}$ . . . . .	148
A.11	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à $120^\circ$ dans la réaction $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie basse énergie. . . . .	149
A.12	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à $85^\circ$ dans la réaction $p(1600\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie énergie intermédiaire (20-150 MeV). . . . .	150
A.13	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles ( $24^\circ$ à gauche, $80^\circ$ au centre et $120^\circ$ à droite) dans la réaction $p(63\text{MeV})+\text{Pb}$ . Les figures du haut concernent les modèles incorporant une phase de <i>pré-équilibre</i> et les figures du bas les modèles n'incorporant pas une phase de <i>pré-équilibre</i> . . . . .	151
A.14	Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles avant ( $0^\circ$ à gauche, $10^\circ$ au centre et $25^\circ$ à droite) dans la réaction $p(1200\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ) . . . . .	152
A.15	Distributions angulaires du facteur de déviation (ou <i>FoM</i> ) $M$ (décrit page 87) pour les réaction $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ et $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ) . . . . .	153
A.16	Spectres doublement différentiels de production de neutrons aux angles arrières. À $150^\circ$ dans la réaction $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ (à gauche) et $160^\circ$ dans la réaction $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ (à droite) . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ) . . . . .	154
A.17	Multiplicités moyennes de neutrons. À gauche, pour des neutrons de basses énergies (entre 2 et 20 MeV) dans les réactions $p(800\text{ MeV})+\text{Fe}$ , $p(1200\text{ MeV})+\text{Fe}$ et $p(1600\text{ MeV})+\text{Fe}$ et, à droite, pour des neutrons de hautes énergies ( $\geq 20\text{ MeV}$ ) dans les réaction $p(800\text{ MeV})+\text{Pb}$ , $p(1200\text{ MeV})+\text{Pb}$ et $p(1600\text{ MeV})+\text{Pb}$ . . . . .	155
A.18	Distribution de multiplicités de neutrons dans la réaction $p(1200\text{ MeV})+\text{Pb}$ . . . . .	156
A.19	Spectres de neutrons produits en cibles épaisses à SATURNE. En haut les deux graphes concernent la même expérience $p(800\text{ MeV})+\text{Fe}$ , alors que les graphes du bas les expériences $p(1,6\text{ GeV})+\text{Fe}$ (gauche) et $p(1,6\text{ GeV})+\text{W}$ (droite). Les caractéristiques des expériences sont indiquées sur les graphes ( $\Phi$ : diamètre ; L : longueur ; pos : position ; zones vues par les détecteurs données pour chaque angle à droite des graphes (bleu foncé (zone vue totalement) - bleu clair (zone vue partiellement))). Les modèles présentés sont indiqués sur les différents graphes. . . . .	157

A.20 Spectres de neutrons en cibles minces. A gauche, résultats des modèles INCL4.2-Abla (rouge) et INCL4.5-Abla07 (vert) pour la réaction $p(800 \text{ MeV})+\text{Fe}$ (figure tirée du rapport de stage de S. Taylor (Taylor 2010) et, à droite, résultats du modèle Bertini-Dresner pour la réaction $p(1600 \text{ MeV})+\text{Fe}$ . . . . .	158
A.21 Distributions en masse du Kr obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies( $E \leq 20 \text{ MeV}$ ) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum) ). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.	159
A.22 Distributions en masse du Xe obtenues avec une cible épaisse de ThCx bombardée par des protons de 1,0 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies( $E \leq 20 \text{ MeV}$ ) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum) ). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.	160

## Liste des tableaux

1.1 Différentes expressions et valeurs du paramètre de densité de niveau $a$ à travers les âges. . . . .	21
2.1 Système de notation proposé par R. Michel pour caractériser globalement les modèles. . . . .	62
2.2 Découpage en différents domaines en masses, caractéristiques de mécanisme de production. . . . .	62
2.3 Système de notation proposé par F. Gallmeier pour caractériser globalement les modèles. . . . .	68
2.4 Caractéristiques des expériences de spectres de neutrons faites à SATURNE en cibles épaisses. . . . .	79
3.1 Valeurs des paramètres utilisés pour le calcul de <i>coin de table</i> des contributions à la production de tritium. Les densités sont des données de base ou tirées des calculs du code CINDER'90, les sections efficaces tirées de (Leray et al. 2010) pour le fer et des bibliothèques de CINDER'90 moyennées sur le spectre des neutrons en jeu, et les flux sont donnés par les calculs MCNPX. . . . .	115
3.2 Contributions en pourcentage des différentes voies pour la production de chaque isotope de l'astate (cas 1,4 GeV). . . . .	116



# INTRODUCTION

D'un point de vue purement administratif ce mémoire a pour but l'obtention d'une habilitation à diriger des recherches (HDR). D'un point de vue scientifique il est l'occasion de présenter une dizaine d'années de travaux ayant pour fil directeur les réactions de spallation. La spallation est le thème qui s'est naturellement imposé pour cette HDR, puisqu'il m'occupe depuis 2001. Si j'ai eu auparavant deux expériences aussi différentes qu'enrichissantes, avec une thèse traitant du mécanisme de photo- et électro-production de particules étranges sous l'angle théorique puis un poste d'ingénieur-chercheur neutronicien auprès d'un réacteur de recherche, la cohérence m'a incité à ne pas mélanger les genres et à présenter un sujet plutôt qu'un parcours. Il est toutefois à noter que les connaissances et compétences acquises avant mes années spallation m'ont été évidemment utiles et plus encore les raisons de mon arrivée dans le domaine.

Dans cette introduction je voudrais dire brièvement pourquoi j'ai choisi d'étudier les réactions de spallation. La réaction de spallation est une branche de la famille des réactions nucléaires. Elle est définie comme l'interaction nucléaire entre une particule légère, le plus souvent un nucléon, et un noyau atomique à une énergie de l'ordre de 100 MeV à 2-3 GeV, la particule voyant le noyau comme un sac de nucléons libres. Les réactions de spallation ont deux origines : l'espace et les accélérateurs. L'espace est baigné par le rayonnement cosmique dont une partie du spectre induit la spallation sur les corps se trouvant sur son chemin. Je l'appellerai spallation *naturelle*. Dans les accélérateurs la spallation est, disons, *mise en œuvre*, c'est à dire que les particules légères, ou les noyaux dans le cas de la cinématique inverse, sont accélérés à l'énergie voulue et projetés contre la cible. On peut préciser d'ailleurs que, si la spallation a suscité un grand intérêt au départ, c'était en tant que génératrice de neutrons. Les études ou l'utilisation que l'on peut faire de la spallation *naturelle* ou de la spallation *mise en œuvre* peuvent dans les deux cas être dédiées soit à la recherche fondamentale, donc au développement des connaissances (ex : origine de certains noyaux ou étude des météorites, pour la *naturelle* ; production de noyaux exotiques ou étude de molécules par neutron de spallation pour la *mise en œuvre*), soit à des questions techniques, donc à l'utilisation des connaissances (ex : étude des dommages à l'électronique embarquée, pour la *naturelle* ; aide à la transmutation des déchets nucléaires, pour la *mise en œuvre*). La spallation est bien entendue intéressante à étudier en elle-même en tant que mécanisme de réaction nucléaire. Si les premières études remontent à plus de soixante ans, sa connaissance approfondie remonte à ces quinze dernières années, tant expérimentalement que du point de vue de la modélisation. Les efforts continuent pour en avoir une description et une compréhension la plus complète et précise possible. Il faut aussi noter que la notion d'efficacité du modèle en terme de temps de calcul est importante ici, car ces modèles microscopiques sont appelés à être utilisés dans des codes de transport en tant que générateurs d'évé-

nements. Cette utilisation des modèles par le plus grand nombre oblige de plus à leur validation suivant leur utilisation ou d'une manière plus globale. Ainsi, de la physique fondamentale à la physique appliquée, de la compréhension à la mise en pratique, les activités et les buts sont divers et variés en spallation. C'est donc cette pluri-disciplinarité qui m'a attirée.

Les trois premiers chapitres correspondent chacun à une activité particulière que j'ai eu autour de la spallation. Activité pouvant être déclinée sous plusieurs formes ou variantes. Le dernier chapitre est, lui, dédié aux perspectives, en s'appuyant parfois sur des débuts de pistes explorées.

Le *premier chapitre* traite de la modélisation des réactions de spallation et des codes associés. Mon effort dans ce domaine s'est surtout porté sur l'implantation des codes *maison* dans un code de transport, MCNPX, pour pouvoir les utiliser dans tous les cas où les réactions de spallation s'enchaînent.

Le *deuxième chapitre* montre le problème de la validation des codes, dont la première difficulté est la définition même ou en d'autres mots l'énoncé de l'objectif. Il sera entre autre fait mention du projet *Benchmark of spallation models* dans lequel je me suis beaucoup investi.

Le *troisième chapitre* présente des projets où l'on a appliqué nos modèles de spallation à des sujets bien spécifiques et regroupés en deux grands thèmes : construction de bases de données et simulation d'installations dotées de cibles de spallation.

Le *quatrième chapitre* est l'occasion d'aborder des sujets ou idées à creuser pour l'avenir. Il est basé à la fois sur le potentiel des nouveaux codes, sur les travaux traités dans les chapitres précédents et sur d'autres travaux plus anciens.

Bonne lecture !

# RÉACTION DE SPALLATION, MODÉLISATIONS ET CODES ASSOCIÉS

1

LA grande majorité des gens qui traite de la spallation le font en tant qu'utilisateur. Ils ont besoin d'avoir des codes de calcul capables de simuler les réactions de spallation qui existent dans leur projet, quelles soient voulues ou subies. Ainsi c'est au sein des codes de transport de particules que les modèles de spallation sont le plus souvent utilisés. Planter un code de spallation dans un code de transport a été ma première contribution à la spallation : implantation des codes INCL4.2 (Boudard et al. 2002) et Abl (Junghans et al. 1998) dans MCNPX (Hendricks et al. 2005). Ce pensum informatique dont seul le résultat motive est en fait un passage moins anodin qu'il n'y paraît. L'objet d'étude devient l'outil de production, la finalité devient moyen. Ce passage de relais oblige à penser autrement, à *s'ouvrir à d'autres contraintes*<sup>1</sup>.

Ce chapitre traite donc des réactions de spallation de leur définition à leur mise en code sans prétendre être exhaustif, mais en montrant l'état d'esprit dans lequel on les étudie dans le groupe de spallation du SPhN. Ainsi sont abordés la spallation sous ces généralités, sa modélisation avec les différentes approches, une mention spéciale sera faite au code *maison* INCL4 et au code Abl, et pour finir l'implantation de ces derniers dans les codes de transport de particules dont notamment MCNPX.

## 1.1 LES RÉACTIONS DE SPALLATION - GÉNÉRALITÉS

Avant toute chose il faut bien sûr définir de quoi l'on parle ou va parler. Cette partie sur les généralités est là pour ça et présentera donc les caractéristiques des réactions de spallation, les raisons pour lesquelles on s'intéresse à ces réactions et finira avec les expériences et les données expérimentales. La modélisation aura droit à bien plus de place après dans ce chapitre. Cette disproportion entre expérience et modélisation ne reflète rien d'autre qu'une certaine *hémiplegie* de ma part dans le domaine : je ne suis pas expérimentateur. Pour une description beaucoup plus détaillée et fournie que celle qui va suivre, je recommande le livre de D. Filges et F. Goldenbaum "*Handbook of Spallation Research*" (Filges et Goldenbaum 2010). De plus j'irai d'autant plus à l'essentiel en étant concis et direct que ce genre d'introduction nécessaire se retrouve sous des formes plus ou moins différentes dans les thèses et habilitations déjà écrites sur le thème de la spallation

---

1. ... pour les impatientes, allez page 48

dont celle du groupe spallation du SPhN (Vuillier 1998, Fernandez-Dominguez 2003, Villagrasa-Cantón 2003, Ducret 2006, Le Gentil 2006, Gorbinet 2011) ainsi que dans les quelques, très approximativement, deux mille articles écrits sur le sujet. La figure 1.1 ci-dessous concerne les publications des éditions *Elsevier* et *The Physical Review Online Archive* ayant le mot spallation dans le titre ou le résumé. On voit un regain d'intérêt très fort du sujet à partir des années 90 et qui s'accélère autour de l'année 2000. Ceci s'explique notamment par les progrès technologiques concernant les accélérateurs. Ainsi jaillirent les idées de transmutation des déchets nucléaires, voire de production d'énergie, grâce aux réactions de spallation (Bowman et al. 1992, Rubbia et al. 1995), ainsi que les projets de sources de neutrons en Europe (ESS - premier faisceau prévu avant 2020) (Lindroos et al. 2011), aux Etats-Unis (SNS - démarré en 2006) et au Japon (JSNS - démarré en 2008). Evidemment tous ces projets suscitèrent des études, de nouvelles expériences pour fournir des données et des développements de modèles dont il fallait connaître le degré de fiabilité (Blann et al. 1993, Michel et Nagel 1997). Ce dernier thème est le cœur du chapitre 2.

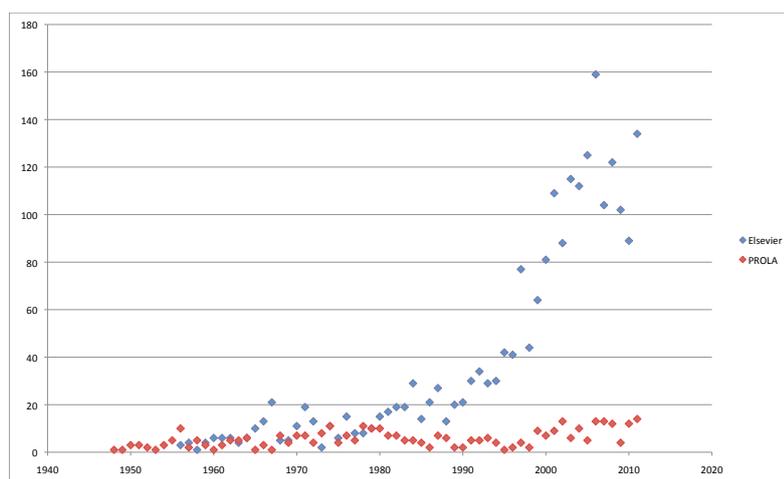


FIGURE 1.1 – Nombre de publications dans *Elsevier* et *PROLA* (*Physical Review Online Archive*) ayant le mot *spallation* dans le titre ou le résumé depuis 1948.

### 1.1.1 Caractéristiques

Les premières études de réactions de spallation ont eu lieu en 1947 à Berkeley au cyclotron de l'Université de Californie (Brobeck et al. 1947). Plusieurs expériences, articles A8 et A9 de (Kaplan 1947), avec des faisceaux de deutons et d'alpha d'énergie 200 et 400 MeV respectivement, ont pu mettre en évidence l'émission multiple de neutrons et de particules chargées qui aboutit à la production d'un grand nombre de noyaux résiduels différents et parfois loin en masse de la cible. Des mesures de spectres de neutrons ont aussi été prises et comparées, plutôt avec succès, à la théorie de R. Serber. Serber est le premier à avoir décrit, en 1947 également, le processus de la réaction de spallation en deux étapes (Serber 1947). Je reviens sur la modélisation de la réaction plus loin (section 1.2, page 11).

D'un point de vue historique et sémantique, le terme spallation aurait été<sup>2</sup> la première fois utilisé par G. T. Seaborg dans sa thèse en 1937 parlant de *nuclear spallation*. Les premières publications mentionnant le terme spallation chez Seaborg datent de 1948 : O'Connor et Seaborg (1948) (dans le titre) et Seaborg et Perlman (1948) (page 587). Pour l'anecdote aucun article de Serber dans *Physical Review* ne mentionne le terme de spallation, son article mentionné précédemment (Serber 1947) porte d'ailleurs le titre *Nuclear Reactions at High Energies*. J'explique ci-dessous le sens que je donne au mot spallation pour éviter toute ambiguïté par la suite.

Il est habituelle de définir les réactions de spallation comme des réactions nucléaires entre une particule énergétique et un noyau atomique. Comme les notions *particule* et *énergétique* sont floues ou plus exactement très variables suivant les domaines et les personnes, je donne ici les miennes, c'est à dire celles que j'ai fixées pour ce mémoire. *Particule* : lepton ou hadron de masse inférieure ou égale à la particule  $\alpha$ . *Particule énergétique* : particule ayant une énergie telle que pour elle le noyau est un ensemble de nucléons libres. La limite inférieure en énergie de la particule incidente se situe ainsi vers 150 MeV. La limite supérieure est plus difficile à fixer, aussi de manière arbitraire je la fixerai ici à 2,5 GeV, car beaucoup de modèles ne sont valides que jusqu'à cette énergie du fait qu'ils ne prennent en compte que la résonance  $\Delta$ . Aller au-delà ouvre de nouvelles voies et rend plus complexe la description. Aux énergies inférieures à la limite basse et aux énergies supérieures à la limite haute je parlerai d'extension de la spallation, même si la notion d'extension est bien différentes dans les deux cas.

Lorsque l'on cherche à modéliser cette réaction ainsi définie on se heurte alors à la définition des produits de la réaction. A ce sujet un terme a paradoxalement, mais volontairement, été omis dans la définition précédente, : éclatement du noyau. Cette dernière notion est des plus subjectives qu'il soit. Doit-on avoir émis un, deux, trois, ou plus de nucléons pour parler d'éclatement ? Est-ce que la cassure en deux noyaux de masses plus ou moins égales accompagnée de quelques nucléons émis est un éclatement ? Préférant m'en tenir à ma définition les produits de la réaction seront tous d'abord des produits de spallation, puis ensuite seront caractérisés par le mécanisme qui en est à l'origine, car la réaction de spallation est en fait un ensemble de processus nucléaires qui se suivent ou sont en compétition : réactions directes, pré-équilibre, évaporation, fission, cassure binaire, multifragmentation. Ces termes seront définis dans le paragraphe modélisation.

Enfin, les réactions de spallation, contrairement à la fission due aux neutrons thermiques, sont des réactions endo-énergétiques. Ainsi dans un massif de matière il pourra y avoir des réactions successives du fait de l'énergie possiblement élevée de certaines particules émises, mais pas divergence. Ce sont ces réactions successives qui permettront notamment d'obtenir un haut flux de neutrons par spallation (van der Meer et al. 2004) et d'espérer des pics de flux de neutrons thermiques à ESS de  $2.10^{17} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  (Bauer 1997).

### 1.1.2 Pourquoi sont-elles étudiées ?

Les raisons et motivations pour étudier ces réactions sont diverses. Il y a bien sûr la compréhension du mécanisme de la réaction. On connaît assez bien les données d'entrée (type du projectile, son énergie, masse A et charge Z de la cible), on fait des mesures des produits sortants (particules, noyaux) en quantité, en fonc-

2. Je n'ai pas pu me procurer la thèse de Seaborg

tion de l'angle, de l'énergie et reste ensuite à essayer de comprendre le mécanisme de l'interaction. Les données expérimentales sont un élément crucial pour la compréhension et la modélisation même du phénomène. Si pour la fission par neutron thermique il a été possible de lancer un programme expérimental exhaustif pour faire une base de données des produits résultants, c'est inimaginable pour la spallation du fait de la gamme en énergie qu'il faudrait couvrir et ce pour tous les noyaux possibles (pas seulement les fissiles). Aussi les expériences mettant en jeu les réactions de spallation ont pour but de caractériser au mieux une région de la spallation en projectile, en énergie, en type de cible, type de produits détectés pour permettre de mieux appréhender le phénomène et ne considérer pour la modélisation que les mécanismes essentiels<sup>3</sup>. Un domaine intéresse donc d'autant plus que les moyens de mesures se développent, s'améliorent, mais, aussi et sans doute surtout, s'il devient point d'entrée, élément indispensable, sujet incontournable à d'autres domaines. Ce sont ces raisons qui ont relancé l'attrait de la spallation depuis les années 90 et dont voici quelques exemples.

Les réactions de spallation permettent de fournir des neutrons utiles à la fois pour la recherche fondamentale avec des faisceaux de neutrons collimatés et mis à bonne température pour obtenir la longueur d'onde souhaitée, c'est ce que l'on appelle communément les sources de neutrons, et pour la recherche appliquée avec un flux de neutrons servant à piloter des réacteurs nucléaires sous-critiques (ADS pour *Accelerator Driven System*) ayant pour but notamment la transmutation de certains déchets nucléaires. On citera à ce sujet le projet *Myrrha*, un ADS qui devrait être construit à Mol en Belgique. En ce qui concerne les sources de neutrons on recitera SNS, JSNS et le projet ESS.

L'étude des noyaux atomiques a naturellement débuté avec les noyaux stables, puis a continué avec les noyaux radioactifs et continue toujours, car d'une part ils sont très nombreux, de l'ordre de 3000 ([www.nucleonica.com](http://www.nucleonica.com)), et d'autre part on arrive encore à en créer de nouveaux, plus riches en proton ou neutron. Cependant, à la fois pour en créer de nouveaux, mais aussi pour en avoir des quantités suffisantes pour pouvoir les étudier expérimentalement, il faut avoir et maîtriser la technologie et les mécanismes de production adéquates. Là encore la spallation joue un rôle important. Elle permet de fournir des faisceaux d'ions radioactifs notamment exotiques par différentes voies. Ainsi lors du projet EURISOL-DS (European Isotope Separation On-Line - Design Study - (Cornell et al. 2009)) il a été étudié deux types de production : i) la voie directe où les noyaux sont directement produits par les réactions de spallation du faisceau sur les noyaux de la cible et ii) la voie de fission où la spallation dans un convertisseur est là encore source de neutrons qui servent à faire fissionner des noyaux d'uranium. Je reviens sur ce projet au chapitre 3. Aussi la connaissance des mécanismes de réaction de spallation permet d'optimiser les installations précédentes en obtenant le meilleur rendement (physico-économique) avec une sûreté maximale.

On peut ajouter à ces exemples ceux issus du rayonnement cosmique galactique (ou GCR, *Galactic Cosmic Ray*) dont une partie importante du spectre se situe dans le domaine énergétique de la spallation. Ce GCR est à l'origine de dommages subis par les missions spatiales, les prévoir pour les maîtriser est important

---

3. Comme l'écrit Albert Messiah dans le tome 2 de son ouvrage "Mécanique quantique" (Dunod, Paris, 1995 - ISBN 2 10002427-2) : "En pratique aucun système physique ne peut être étudié sans approximation; l'art du physicien consiste précisément à se faire une idée exacte de l'importance relative des différents effets et à adopter dans chaque cas les méthodes d'approximation qui conviennent"

(Mancusi et al. 2011b). Il est aussi responsable selon toute vraisemblance des différences d'abondances de Li, Be et B dans l'espace interstellaire et le système solaire (ex. : Mashnik (2000)). Une modélisation fine de la spallation pourra l'affirmer ou l'infirmier. Enfin ses interactions avec les météorites peuvent fournir des informations intéressantes sur l'histoire des météorites, mais aussi le GCR lui-même, à condition encore que l'on maîtrise le mieux possible la modélisation des réactions de spallation.

### 1.1.3 Mesures expérimentales

Mettre en évidence un fait, l'éclairer sous différents angles et fournir des informations sont les différents rôles des expériences. Suivant les buts recherchés, les expériences mises en oeuvre sont diverses. On peut vouloir caractériser une cible de spallation ou un dispositif mettant en jeu la spallation, comme par exemple une source de neutron dont on voudrait connaître les performances pour l'optimiser, cherchant le compromis entre rendement, sûreté et coût. Dans ce cas un faisceau de protons d'environ 1 GeV sur des cibles lourdes et épaisses sera utilisé. On peut vouloir étudier les interactions du GCR avec les corps qu'il rencontre comme mentionné dans la section précédente, et l'objectif principal dans ce cas est de connaître les rendements de noyaux produits par ces interactions aux énergies du GCR et en-dessous (ralentissement par pénétration). On peut aussi vouloir étudier le phénomène microscopique en lui-même et voir ce qu'il peut nous apprendre sur le noyau atomique en interaction. Dans ces deux derniers cas des cibles fines permettant de s'affranchir des réactions secondaires seront nécessaires.

On peut donc diviser les mesures expérimentales en deux grandes familles, les mesures avec cibles épaisses et les mesures avec cibles minces. Des premières on cherche plus à en tirer des informations utiles à une application particulière, alors que les secondes apporteront des renseignements utiles à la description du mécanisme des réactions de spallation. Cependant la frontière n'est pas si hermétique. Ainsi les premières font ressortir des caractéristiques importantes et persistantes sur lesquelles les secondes peuvent apporter des éclairages intéressants, et les données en cibles minces peuvent aussi être utilisées directement pour des applications particulières.

#### Cibles épaisses

Puisqu'à l'origine la spallation avait pour but la production de neutrons et que de toutes les particules produites ce sont elles qui sortent le mieux de la cible, il n'est pas étonnant que le plus grand nombre d'expériences concerne la multiplicité des neutrons ainsi que leurs spectres. Un récapitulatif, tiré de la référence (Filges et Goldenbaum 2010), des expériences publiées traitant de la multiplicité de neutron ou du spectre des neutrons issus de réactions de spallation dans une cible épaisse est donné par la figure 1.2.

On retrouve l'objectif applicatif de ces expériences dans le choix des cibles. Ainsi pour la multiplicité de neutrons le plomb est la cible par prédilection, car c'était le matériau lourd le plus en vue pour les sources de neutron et les ADS. On voit cependant apparaître ensuite quelques expériences avec du tungstène, du mercure et du bismuth ; ces trois matériaux ayant aussi leur intérêt comme cible. Ainsi l'on retrouve à SNS et J-PARC des cibles de mercure liquide, cibles aussi étudiées dans le cadre du projet EURISOL-DS, à ESS la cible prévue sera un disque en rotation de tungstène, alternative aussi étudiée à SNS (McManamy et al. 2010),

Tab. 11.9 Summary(I) of published thick target experiments with respect to the time of publication, incident proton energy, target material, and target dimensions.<sup>a</sup>

Time of publ.	Incident proton energies (GeV)	Targets and dimensions $\emptyset, L$ (cm)	Measured quantity	Method	References
1965	0.47/0.54/ 0.72/0.96/ 1.47	Be $10.2 \times 10.2 \times 91.6$ Sn, Pb, U $\emptyset = 10.2, L = 61$ Pb, $\emptyset = 20.4$	$M_n/p$	MOD Au-foils	[59]
1968	0.4/0.5/0.66	Pb, $\emptyset = 10 - 26$ $L = 55$	$M_n/p$	Fission chambers	[818]
1971	various 0.316 – 0.998	Pb, $\emptyset = 10$ $L = 60$	$M_n/p$	MOD $BF_3$	[815]
1973	0.73	$^{238}U$ $\emptyset = 15, L = 60$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF NE202/228	[125]
1979	0.26	Fe, $^{238}U$	$M_n/p$	TOF LQ – SCIN	[804]
1983	0.1	Pb, $^7Li, \emptyset = 6.2/5.7$ $L = 1.6/17.4$	$M_n/p$	MOD, Au-foils	[819]
1983	0.25	Pb, $\emptyset = 5$ $L = 10$	$M_n/p$	$^{235}U, ^{238}U$ SDTR	[820]
1987	0.1	Fe, Cu, Th, $\emptyset = 6$ $L = 1.6$		MOD Au-foils	[803]
1989	0.113	Be, C, Al, Fe, $\emptyset = 3.65$ $L = 5.70/5.83/4.03/1.57$ $^{238}U, \emptyset = 4, L = 3$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF BC418	[697]

<sup>a</sup> The measured quantities are given (1)  $d^2\sigma/dEd\Omega$  (the angular distribution of the leakage neutron spectra), (2)  $M_n/p$  (mean number of leakage neutrons per incident beam proton, and the employed methods are (1) TOF), MOD (moderation in  $H_2O$  and polyethylene). The neutron distributions and spectra are measured with Au foils,  $BF_3$  counters, plastic and liquid (LQ-SCIN) scintillators, and solid track (SDTR) detectors.

Tab. 11.10 Summary(II) the same as in Table 11.9 but recently some additional methods are employed with the n-ball experiment to measure neutron multiplicity distributions  $dP_{\text{reac}}/dM_n$  are indicated (see Table 11.8) (also threshold detectors and  $^3H$  counters are used).

Time of published	Incident proton energies (GeV)	Targets and dimensions $\emptyset, L$ (cm)	Measured quantity	Method	References
1990	0.256	C, Al, Fe, $\emptyset = 8$ $L = (C)17.45/30$ (Al)12.15/20 (Fe)4.7/8 $^{238}U, \emptyset = 4$ $L = 3.5$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF BC418	[696, 698]
1991	0.99–8.1	Pb $\emptyset = 20, L = 60$	$M_n/p$	MOD $^3He, BF_3$	[617]
1995	0.5/1.5	Pb, $15 \times 15 \times 20 \text{ cm}^3$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF, NE213	[808, 821]
1996	0.8/1.0/1.2/1.4	Pb, W, $\emptyset = 10.2$ $L = 61/40$	$M_n/p$	MOD $^3He$	[796, 797]
1997	0.895/1.21	W $\emptyset = 20, L = 60$	Leakage spectra	Threshold detectors	[822]
1998	0.197	Pb, $\emptyset = 12$ $L = 2 - 25$	$dP_{\text{reac}}/dM_n$	n-ball, NE343 +0.3%wt Gd	[632]
1998	1–5	Pb, U, $\emptyset = 15/8$ $L = 5/35/20/40$	$dP_{\text{reac}}/dM_n$	n-ball, NE343 +0.4%wt Gd	[631]
1999	0.5/1.5	Pb, $15 \times 15 \times 60 \text{ cm}^3$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF, NE213	[808]
2000	0.4/0.8/1.2 1.8/2.5	W, Hg, Pb	$dP_{\text{reac}}/dM_n$	n-ball, NE343 +0.4%wt Gd	[115]
2001	0.8/1.2/1.6	Pb, $\emptyset = 20$ $L = 105$	$d^2\sigma/dEd\Omega$	TOF NE213	[133]
2004	0.42/0.59	Pb, Bi, $\emptyset = 10$ $L = 16/18/30$	$M_n/p$	MOD Au-foils	[814]

FIGURE 1.2 – Les expériences publiées sur la production de neutron en cibles épaisses. Tiré de (Filges et Goldenbaum 2010)

et l'ADS Myrrha devrait avoir une cible de plomb-bismuth liquide, comme était la cible irradiée pendant quatre mois fin 2006 de Megapie. Ce dernier projet sera abordé au chapitre 3 (section 3.2.2, page 111).

Quelques expériences mesurant les spectres des neutrons en angles et énergies ont été menées. Bien que ce soient des observables plus fines que les multiplicités, vu que ces dernières sont intégrées, ces spectres sont en général aussi bien reproduits par les modèles et n'apportent donc souvent qu'une vérification de la qualité des modèles pour ce genre d'observables. Ceci vient du fait que les neutrons sont les particules les plus produites d'une part, et que d'autre part en cible épaisse les diffusions multiples pour les angles et le ralentissement pour les énergies ont tendance à niveler les résultats finals. Des calculs faits sur les expériences SATURNE (Ménard 1998, Varignon 1999) et KEK (Meigo et al. 1999) le montrent bien (David et al. 2003).

Pour revenir sur les multiplicités de neutron, on peut toutefois noter que, si celles-ci croissent quasiment linéairement avec l'énergie jusqu'à 2-2,5 GeV, leur progression avec l'énergie incidente s'infléchit (figures 9 et 10 de van der Meer et al. (2004)). Ceci révèle l'ouverture de nouvelles voies, comme l'émission de pions multiples et même de kaons. L'effet principal de ces nouvelles voies ouvertes pendant la cascade est de réduire l'énergie d'excitation du noyau avant l'évaporation, et donc l'émission de neutrons.

Les données expérimentales concernant les noyaux résiduels produits dans des cibles épaisses sont beaucoup plus rares. L'on peut citer les expériences faites à ISOLDE (ex. : Bergmann et al. (2002)), les expériences de LANL sur un bloc de plomb et un bloc de tungstène (Ullmann et al. 1995), l'expérience faite à DUBNA (Pohorecki et al. 2006) et celle de SATURNE (Ducauze 2001). De ces expériences on tire des productions d'isotopes soit globalement dans tout le massif, soit longitudinalement, soit encore radialement à différentes profondeurs dans la cible. Les difficultés avec ces données expérimentales viennent du fait qu'elles sont souvent sujettes à de grandes barres d'erreurs et peu nombreuses. Ceci étant certaines d'entre elles ont été utilisées et sont discutées dans le chapitre 2 (section 2.3.2, page 80).

Enfin il existe d'autres types de mesures sur les cibles épaisses utiles à certaines applications, comme notamment l'énergie déposée dans la cible ou les dommages créés. N'ayant pas traité ces sujets du fait qu'ils ne peuvent pas vraiment en retour apporter quelque chose à la physique de la spallation, je laisse les personnes intéressées consulter par exemple la section 11.2.5 de (Filges et Goldenbaum 2010), ainsi que le mémoire de thèses de C. Villagrasa (Villagrasa-Cantón 2003) ou les articles de Konobeyev et al. (2007) et Korovin et al. (2008).

### **Cibles minces**

Les données expérimentales tirées de cibles minces ont pour but l'étude même de la réaction de spallation. La définition même de cible mince d'ailleurs est une cible dans laquelle le projectile incident n'interagit au mieux qu'une seule fois avec un noyau. Ainsi on s'affranchit de tout phénomène de transport et des réactions secondaires. S'il est possible de produire de telles cibles, il arrive que les caractéristiques soient proches de la définition, mais pas exactement. Suivant ce que l'on mesure les conséquences peuvent être différentes. Un premier exemple est donné dans la référence (Leray et al. 2002) où les auteurs ont estimé l'effet de la taille de la cible sur un spectre de neutron et un second exemple est donné par l'étude

d'une expérience récente (chapitre 4, section 4.2, fig. 4.2, page 127) qui a montré les difficultés pour corriger les effets d'une faible épaisseur sur la production de particules chargées.

Il est difficile de parler des données expérimentales en cible mince sans risquer des redites avec le chapitre 2 sur les *benchmarks* et notamment celui de AIEA. Aussi ici je ne donnerai que les principaux renseignements que l'on peut tirer de tel ou tel type de mesures, sachant que l'on regroupe souvent les particules observées en grandes familles : les neutrons, les particules chargées (p, d, t,  $^3\text{He}$ ,  $\alpha$ ), les fragments de masses intermédiaires, les noyaux résiduels (que l'on appellera résidus dans ce mémoire), et les pions.

Les neutrons ne sont pas les particules les plus contraignantes pour les modèles. Elles sont produites en grand nombre et leurs modes de production sont relativement bien maîtrisés. Cependant l'on verra plus loin dans ce mémoire que des efforts de modélisation peuvent encore être faits. Ainsi les spectres doublement différentiels en angle et en énergie révèlent la présence de mécanismes qu'il faut prendre en compte de manière adéquate. On peut citer i) aux angles avant le pic quasi-élastique venant de l'éjection d'un neutron par la particule incidente n'ayant pas subi d'autres collisions et le pic quasi-inélastique venant de la désintégration d'une résonance  $\Delta(1232)$  en un pion et un neutron, ii) aux énergies intermédiaires, la bonne prise en compte du passage entre la fin des réactions directes et le début de la phase de désexcitation et iii) aux basses énergies l'évaporation nécessitant la bonne compétition avec toutes les autres voies de désexcitation et de bonnes données d'entrée venant de la phase directe, comme l'énergie d'excitation.

Le spectre des particules légères chargées est en partie comparable à celui des neutrons à quelques exceptions et nuances près. Il faut déjà séparer en deux cette famille, avec d'un côté le proton et de l'autre les particules que l'on appellera composites par la suite et qui sont le deuton, le triton, l'hélium 3 et l'alpha. Le proton ne se différencie du neutron que par sa charge, ce qui fait que son spectre aura une caractéristique supplémentaire, une barrière coulombienne, rendant plus difficile l'émission, surtout pendant l'évaporation où les particules sont faiblement énergétiques. Les composites elles ont une caractéristique supplémentaire encore : elle n'existe pas a priori dans le noyau. Il existe bien sûr des études qui montrent que ces particules ont des probabilités d'existence dans tel ou tel noyau (Beck 2010), mais dans une description des réactions de spallation il est plus juste de recourir à des processus comme le processus de coalescence pendant la phase de cascade et pour la phase d'évaporation de considérer une certaine probabilité de pré-existence contenue dans les sections efficaces de capture utilisées comme ingrédients. Les spectres mesurés permettent ainsi de justifier et d'apprécier les choix de description faits.

Les fragments de masses intermédiaires sont des noyaux plus lourds que les composites, mais de masses telles qu'il semble difficile de les obtenir d'une cible comme résultant de simples émissions de neutrons et particules légères chargées, ni même par fission pour les cibles les plus lourdes. Ceci en donne une définition encore un peu floue, aussi nous considérerons que ces fragments ont des masses comprises entre  $A=3$  et  $A\approx 20$ . La difficulté liée à ces particules est leur mode donc de production. Les mesures expérimentales les concernant sont à la fois celles des particules légères, i.e. des spectres doublement différentiels (Bubak et al. 2007, Machner et al. 2006), et celles des résidus, i.e. des distributions en masses, en charges ou encore isotopiques, et aussi des vitesses. Sur le sujet une thèse a récemment été soutenue (Gorbinet 2011), montrant les résultats d'une expérience faites

à GSI, Xe+p à 1 GeV.A avec le dispositif Spaladin, cherchant à préciser les mécanismes de production des particules produites, comme cela avait été fait avant sur le même dispositif avec un faisceau de fer (Le Gentil 2006, Le Gentil et al. 2008). Utilisant entre autres ces données, un article récent traite de la formation de ces fragments, cherchant à savoir par comparaison de données expérimentales diverses s'ils viennent d'évaporations, de cassures binaires ou encore par le biais de multifragmentations (Mancusi et al. 2011a).

Les résidus de spallation peuvent être mesurés par deux méthodes. La méthode directe qui consiste à utiliser comme projectile une particule légère, le plus souvent un proton, et une cible fixe. Les résidus sont piégés dans la cible et on les mesure par spectrométrie  $\gamma$  ou spectrométrie de masse. La seconde méthode consiste à inverser les rôles, c'est la cinématique inverse. Un faisceau d'ions bien définis en masse, charge et énergie frappe une cible de noyaux légers comme une cible d'hydrogène par exemple. La première technique permet d'obtenir des fonctions d'excitation, c'est à dire des taux de production d'isotopes pour de multiples énergies s'étalant de quelques dizaines de MeV à plusieurs GeV. L'inconvénient de la méthode est que l'on ne peut pas mesurer tous les isotopes. La cinématique inverse, elle, permet de mesurer tous les isotopes produits, car, emmenés par la vitesse du faisceau, ils ne restent pas dans la cible et sont facilement mesurés. L'inconvénient ici est que l'on ne peut pas aussi aisément faire varier l'énergie du faisceau. Ces mesures sont donc complémentaires et font partie des grandes avancées sur la spallation des quinze dernières années. Parmi les mesures qui n'ont pas encore été faites et apporteraient des informations très intéressantes on peut citer les fonctions d'excitation avec pour projectile des neutrons (Michel et al. 2005). La difficulté est d'avoir des faisceaux mono-énergétiques. Les références (Bevilacqua 2011, Iwamoto et al. 2010) donnent le genre de spectre que l'on peut obtenir pour les faisceaux à Uppsala et RCNP. Certains auteurs essaient de tirer l'information à partir de cibles épaisses en soustrayant les contributions des autres particules (Leya et Michel 2011), mais, si l'idée est intéressante, les résultats ne semblent recevables que sur une partie du spectre (voir section 3.1.3, fig. 3.11, page 101).

Enfin il y a les pions. Ces particules ont encore peu d'intérêt pour les applications, mais pour le développement des modèles elles apportent des informations qui permettent d'améliorer certains pans de la description. Ainsi ces particules sont issues de la désintégration de la  $\Delta(1232)$ , en combinaison avec un neutron ou un proton, pendant la phase de cascade. Bien reproduire les pions est nécessaire pour s'assurer d'une bonne modélisation de la cascade. Ainsi la voie  $(p, \pi^- xn)$  peut être la voie principale de création d'isotopes particuliers pour une cible donnée. Une étude basée sur une expérience faite à ISOLDE (Tall et al. 2008) avec une cible de plomb-bismuth a montré que certains isotopes de l'astate étaient produit pour une bonne part par l'émission de  $\pi^-$  (Ghali 2010). On reviendra sur ce dernier point au chapitre 3 (table 3.2, page 116).

## 1.2 MODÉLISATION

Les bases de la modélisation des réactions de spallation ont été posées par R. Serber en 1947 (Serber 1947). Contrairement aux réactions de basses énergies où il y a formation d'un noyau composé qui se désexcite ensuite, les réactions de hautes énergies, disons supérieures à 100.A MeV pour reprendre le contexte dans lequel Serber travaillait en 1947, ne peuvent former en général un noyau composé du fait du grand libre parcours moyen du nucléon incident. De plus ce grand libre par-

cours moyen, associé donc à une petite longueur d'onde de de Broglie, permet au nucléon incident de voir les nucléons du noyau comme libre et d'éventuellement diffuser sur quelques-uns. Différents scénarii sont alors possibles en fonction de l'énergie et du paramètre d'impact de la particule incidente, allant de l'éjection d'un seul nucléon emportant avec lui la totalité de l'énergie incidente, à la capture du projectile laissant le noyau dans un état de très forte excitation. Ainsi ces réactions se déroulent en deux phases : la première qui consiste en des réactions directes à l'intérieur du noyau cible initiées par le projectile avec émissions ou non de particules assez énergétiques et aboutissant à un noyau excité, et la seconde qui est la désexcitation de ce noyau. La première est une phase rapide, de l'ordre de  $10^{-22}$  s et la seconde bien plus lente de l'ordre de  $10^{-18}$  s.

Certains auteurs ajoutent une troisième phase. Cette phase, dite de pré-équilibre, se situe entre les deux mentionnées ci-dessus. Elle a pour but de permettre une transition plus douce entre la fin des réactions directes et le début de la désexcitation statistique. Si le débat n'est pas clos sur la pertinence de cette phase intermédiaire, je ne la développerai pas ci-après contrairement aux deux autres. Ce choix est basé sur deux points : i) le modèle de réactions directes INCL4 ne nécessite pas de pré-équilibre par construction (Boudard et al. 2002) et ii) un récent test de nombreux modèles de spallation n'a pas pu prouver la nécessité de cette phase intermédiaire (voir notamment chapitre 2, fig. 2.21, page 73).

### 1.2.1 Première étape : les réactions directes (phase rapide)

#### Les différentes approches

Pour essayer de sortir l'essentiel, tout en sachant que des nuances existent, je diviserai la modélisation des réactions directes en spallation en deux familles : l'approche *académique* et l'approche *recherche*. Le choix de ces deux termes méritent bien sûr d'être clairement expliqués pour éviter toute ambiguïté et quiproquo.

Il faut entendre par *académique*, une approche qui va du général au particuliers, qui part des principes fondamentaux pour reproduire une observable expérimentale en passant par des approximations pour s'adapter aux outils de résolution et/ou palier des ingrédients encore inconnus. L'observation doit découler du formalisme. L'avantage d'une telle approche est qu'à la base toute la physique y est. L'inconvénient est sa difficile mise en oeuvre. Par *recherche* il faut comprendre la philosophie inverse, celle qui va des événements particuliers vers le tout. C'est une démarche pragmatique et économe en ce sens qu'elle ne fait intervenir que les ingrédients supposés nécessaires à la reproduction des observations expérimentales. L'observation suggère le modèle. L'avantage de cette méthode est sa simplicité de mise en oeuvre, d'utilisation et d'adaptation. L'inconvénient est sa portée finie puisqu'ancrée à une échelle donnée.

#### approche *académique*

La description très succincte que je fais ici de l'approche *académique* est basée sur les références (Aichelin et Stöcker 1986, Aichelin et al. 1987; 1989, Aichelin 1991, Gulminelli 2004, Rudy et Kowalczyk 2008).

Que ce soit pour étudier un noyau ou le produit issu d'une particule incidente entrant dans un noyau cible, on se retrouve avec comme système un ensemble de nucléons. Ce système quantique peut être représenté par une fonction d'onde  $|\Psi\rangle$  et l'évolution au cours du temps de ce système est donné par l'équation de

Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H|\Psi\rangle. \quad (1.1)$$

$H$  représente le Hamiltonien du système avec une composante d'énergie cinétique  $T$ , somme des énergies cinétiques de chacun des nucléons du système et une composante d'interaction entre les nucléons  $V$  dont on ne considère souvent que la formulation simplifiée de la somme des interactions à deux corps

$$H = \sum_i T_i + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij}. \quad (1.2)$$

Il est habituel de travailler avec les matrices densité,  $\rho$ , qui permettent d'avoir une expression simple de l'action d'un opérateur  $B$ , par exemple, sur le système :  $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  et  $\langle\Psi|B|\Psi\rangle = Tr(B\rho)$ . Ainsi l'équation d'évolution de Schrödinger 1.1 est remplacée par l'équation de Liouville-Von Neumann

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H, \rho]. \quad (1.3)$$

On peut définir d'autres matrices densité qui se focalisent sur un ensemble  $k$  de nucléons, en intégrant sur les variables des autres nucléons. Ce sont les matrices densité réduites

$$\rho_{1,\dots,k} = \frac{A!}{(A-k)!} Tr_{(k+1,\dots,A)} \rho, \quad (1.4)$$

telles que  $\rho_{1,\dots,A} = \rho$ , avec  $A$  le nombre total de nucléons.

L'évolution de la matrice densité à  $k$  corps est alors régie par l'équation

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{1,\dots,k}(t) = \frac{A!}{(A-k)!} Tr_{(k+1,\dots,A)} \left( \sum_{i=1}^k [T_i, \rho(t)] + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} [V_{ij}, \rho(t)] + \frac{1}{2} (A-k) \sum_{i=1}^k [V_{i(k+1)}, \rho(t)] \right) \quad (1.5)$$

Ainsi on est passé de l'équation de Liouville-von Neumann 1.3 à  $A$  équations couplés reliant les matrices densité à  $k$  corps aux matrices d'ordres supérieurs. Ce système d'équations décrivant un ensemble d'un grand nombre de particules interagissant est connu sous le nom de hiérarchie BBGKY. Les deux premiers ordres sont donnés ci-dessous

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = [T_1, \rho_1(t)] + \frac{1}{2} Tr_{(2)} [V_{12}, \rho_{1,2}(t)], \quad (1.6)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_{1,2}(t) = [T_1 + T_2, \rho_{1,2}(t)] + \frac{1}{2} [V_{12}, \rho_{1,2}(t)] + \frac{1}{2} Tr_{(3)} [V_{13} + V_{23}, \rho_{1,2,3}(t)] \quad (1.7)$$

Si a priori, ou mathématiquement, cela ne simplifie pas la résolution du problème à  $A$  corps, cela permet cependant, dans le cadre d'un problème de physique donné, de pouvoir faire des approximations, ainsi de tronquer la chaîne et de rendre possible plus ou moins facilement la résolution du système.

Si l'on fait les hypothèses d'une force à un corps et de l'absence de corrélation, c'est à dire que l'on néglige les interactions entre les particules (pas de force à courte portée), alors la troncature la plus sévère, l'équation 1.6, est équivalente à l'équation de TDHF (Time Dependent Hartree-Fock), éq. 1.8, moyennant la prise en compte de l'antisymétrisation des fonctions d'onde

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1^{(1)}(t) = \left[ T_1 + U, \rho_1^{(1)}(t) \right], \quad (1.8)$$

où le potentiel  $U$  est souvent une interaction effective de type Skyrme ou Gogny.

Si l'on veut prendre en compte les collisions il faut alors pousser au moins jusqu'à la seconde équation, l'équation 1.7, car il faudra considérer la particule, celle avec qui la collision a lieu et enfin un troisième partenaire qui génèrera le potentiel dans lequel se meut la particule. Ceci fait bien trois participants. Aussi pour résoudre le système il faut commencer par donner une expression à la matrice densité à trois corps  $\rho_{1,2,3}$ . Il existe une formulation complète, mais l'on part habituellement de l'hypothèse que les interactions à trois corps sont négligeables, de sorte que l'on ait bien deux particules en interaction dans un potentiel donné par les autres particules. Moyennant d'autres simplifications techniques issues de considérations physiques, comme par exemple le fait que le temps d'une l'interaction est bien plus petit que le temps entre deux collisions, on aboutit à l'équation de Boltzmann nucléaire

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho_1(t) = & [T_1 + U_1, \rho_1(t)] + \\ & Tr_{(2)} \left[ g \rho_1^{(1)}(t) \rho_1^{(2)}(t) - \rho_1^{(1)}(t) \rho_1^{(2)}(t) g^\dagger \right] + \\ & Tr_{(2)} \left[ g \rho_1^{(1)}(t) \rho_1^{(2)}(t) g^\dagger G_0^{-med} - G_0^{+med} g \rho_1^{(1)}(t) \rho_1^{(2)}(t) g^\dagger \right], \end{aligned}$$

avec  $g$  la matrice de Brückner (interaction effective permettant de simplifier la résolution et contrainte par des données expérimentales) et  $G_0^{\pm med}$  la fonction de Green du milieu.

Cette équation peut aussi s'écrire en considérant non plus la matrice densité, mais sa transformée de Wigner,  $f$ , distribution de probabilité dans l'espace des phases,

$$f(\vec{r}, \vec{p}) = \int d^3 r' e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}'} \rho\left(\vec{r} + \frac{\vec{r}'}{2}, \vec{r} - \frac{\vec{r}'}{2}\right). \quad (1.9)$$

On aboutit alors à l'équation appelée BUU (Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck) ou VUU (Vlasov-Uehling-Uhlenbeck) (Uehling et Uhlenbeck 1933)

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f_1 - \vec{\nabla}_r U \cdot \vec{\nabla}_p f_1 = \\ - \int \frac{d^3 \vec{p}_2 d^3 \vec{p}_3 d^3 \vec{p}_4}{(2\pi)^6} \sigma_{v_{12}} \delta^3(\vec{p}_1 + \vec{p}_2 - \vec{p}_3 - \vec{p}_4) \\ [f_1 f_2 (1 - f_3) (1 - f_4) - f_3 f_4 (1 - f_1) (1 - f_2)], \end{aligned} \quad (1.10)$$

où les  $f_i$  sont les fonctions de distributions (1 et 2 pour l'entrée de la collision et 3 et 4 pour la sortie),  $\sigma_{v_{12}}$  le terme de collision basée sur les données expérimentales et les termes en  $f_i f_j$  et en  $(1 - f_i)$  respectivement le chevauchement des distributions en entrée et sorties de la collision et le principe d'exclusion de Pauli.

Même si la seconde formulation, éq. 1.10, semble plus explicite on ne peut la résoudre analytiquement. Ainsi en pratique on utilise la méthode de la particule test :

- on initialise le projectile (paramètre d'impact et énergie) et le noyau cible (positions des particules test selon une densité nucléaire à la Saxon-Woods par exemple ; moments des particules test tirés aléatoirement de 0 au moment de Fermi, prenant en compte une dépendance avec la densité nucléaire locale),
- puis pour chaque pas en temps jusqu'à un temps d'arrêt donné :
  - on transporte les particules test d'après les équations du mouvement d'Hamilton,  $\vec{r}_i = \vec{\nabla}_{p_i} H$  et  $\vec{p}_i = -\vec{\nabla}_{r_i} H$ , où H est le Hamiltonien où apparaît le potentiel paramétré de type Skyrme par exemple,
  - on teste si des particules sont assez proches pour interagir via des sections efficaces expérimentales,
  - si oui, on choisit le type de réaction et teste le blocage de Pauli des particules créées, puis on continue le transport,
  - si non, on continue le transport.

Cette méthode de la particule test a pour conséquence d'induire des corrélations entre les particules, mais cependant pas assez pour, par exemple, la formation des agrégats.

Si maintenant, gardant la même méthode de résolution, on remplace les particules test ponctuelles par des paquets d'ondes gaussiennes, on obtient le modèle de dynamique moléculaire quantique (QMD pour *Quantum Molecular Dynamics*). QMD a ainsi en plus de BUU/VUU des corrélations à longue portée du fait de la nature gaussienne des fonctions d'ondes, ce qui devrait permettre la formation des agrégats. Comme nous le verrons dans le chapitre 2 (section 2.2.3, page 77), ceci n'est a posteriori pas si évident.

Comme il a été dit en préambule, les *descriptions* faites ici de l'équation BUU/VUU et de QMD n'ont pour but que de montrer l'approche et sa résolution pratique, sans chercher à être détaillées et complètes. Il faut aussi noter que ces modèles sont dédiés à l'origine à l'étude des interactions entre ions lourds, alors que la spallation est une réaction entre une particule et un noyau.

Les personnes intéressées sur les fondements de ces modèles, ainsi que sur des développements récents peuvent se reporter notamment aux références déjà citées au début, de la section (Aichelin et Stöcker 1986, Aichelin et al. 1987; 1989, Aichelin 1991, Gulminelli 2004, Rudy et Kowalczyk 2008), ainsi qu'à un autre article récent (Buss et al. 2012).

### **approche recherche**

En 1947 au synchrotron de Berkeley on identifie pour la première fois les résidus de l'interaction d'un deuton (200 MeV) avec des noyaux de As, Sb et Cu et d'un alpha (400 MeV) avec un noyau d'U (Kaplan 1947). On identifie aussi l'émission de neutron et de particules chargées. Dans la foulée R. Serber pose les bases de cette spallation dans son article (Serber 1947). Un an après les premiers calculs sont publiés par Goldberger (Goldberger 1948). Ces calculs donnent le libre parcours moyen d'un neutron de 90 MeV dans une cible de plomb ainsi que les distributions angulaire et en énergie des neutrons émis et la distribution d'énergie d'excitation du noyau issu de la cascade. Ces calculs prendront le modèle statistique de Bethe (Bethe et Bacher 1936) pour la description du noyau et seront faits

*manuellement*<sup>4</sup>. Dix ans plus tard N. Metropolis et al. publieront les premiers résultats obtenus avec un ordinateur (Metropolis et al. 1958b;a). Ils passeront à 1000 particules incidentes de plusieurs énergies et sur différents noyaux cibles, oublieront certaines approximations et ainsi, améliorant statistiquement leurs résultats et les affinant, ils pourront faire les premières comparaisons avec des données expérimentales et commencera alors la longue quête de la chasse aux défauts.

Les bases de la modélisation posées par Serber ont été récemment ré-évoquées par Y. Yariv (Yariv et al. 2008) pour estimer la portée des hypothèses et expliquer certains résultats étonnement bons. M’inspirant fortement de ces publications je résume ci-après ces bases et le champ d’application qui en découle, ainsi que les ingrédients importants de la modélisation.

Considérant la longueur d’onde de de Broglie réduite  $\lambda$ , la distance internucléon  $d$ , le libre parcours moyen d’une particule dans le noyau  $\Lambda$  et le rayon du noyau  $R$ , alors les hypothèses de Serber se réduisent à l’équation

$$\lambda \ll d < \Lambda < R, \quad (1.11)$$

dont voici la traduction verbale.

- $\lambda \ll d$  - La particule incidente a une énergie telle qu’elle distingue parfaitement les nucléons du noyau qui peuvent être alors considérés comme des particules ponctuelles avec une position et un moment bien définis. On peut alors considérer pour les particules se déplaçant dans le noyau des trajectoires classiques.
- $d < \Lambda$  - Les interactions sont indépendantes les unes des autres (prenant en compte le fait que la durée de l’interaction est courte comparée au temps entre deux interactions).
- $\Lambda < R$  - Les éventuelles interférences entre les ondes diffusées s’annulent du fait d’un nombre important d’interactions.
- $\lambda \ll \Lambda$  - L’onde diffusée atteint sa valeur asymptotique avant la prochaine interaction et les diffusions successives peuvent donc toutes être traitées comme la première de manière classique.

La figure 1.3 tirée de (Yariv et al. 2008) permet de visualiser les domaines de validité de la modélisation en fonction de l’énergie du projectile. Au-delà de 200 MeV les hypothèses sont pleinement vérifiées ( $\xi = \Lambda/\lambda/10 \geq 1$ , soit  $\lambda \leq \Lambda/10$ ) et si on les relâche ne serait-ce que d’un facteur deux ( $\xi$  seulement supérieur à 0.5) on peut espérer utiliser le modèle convenablement à partir de 60 MeV. On voit aussi que le blocage de Pauli à basse énergie du projectile permet une utilisation du modèle à des énergies bien plus basses que l’on pensait a priori, même si ce n’est certes pas le meilleur régime d’utilisation. On peut noter aussi que, si le rapport des temps d’interaction et de parcours entre deux interactions a des valeurs justifiant l’indépendance des interactions, il est intéressant de garder ce critère en tête pour des utilisations à hautes énergies vu la forme de la courbe. Il faut rappeler que la fig.1.3 a été obtenue pour des collisions centrales et que dans le cas de collisions périphériques par exemple d’autres paramètres physiques doivent être pris en compte.

Les bases posées reste à mettre en place la méthode de résolution et le choix des ingrédients. Ces derniers, choisis judicieusement, peuvent permettre d’étendre

4. Le calcul prendra en compte 100 particules incidente ce qui nécessitera [...] *about two weeks full-time work by two people.*

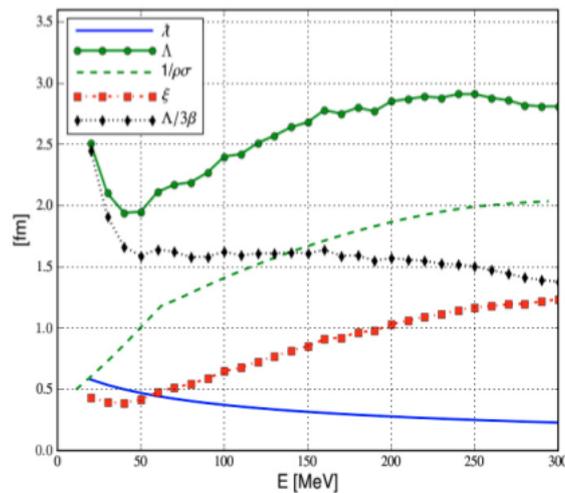


FIGURE 1.3 – Variation de paramètres physiques avec l'énergie du proton incident pour une collision centrale sur un noyau de  $^{208}\text{Pb}$ .  $\lambda$  et  $\Lambda$  sont expliqués dans le texte,  $1/\rho\sigma$  représente  $\Lambda$  si le principe de Pauli n'était pas appliqué ( $\rho$  étant la densité de nucléons au centre du noyau et  $\sigma$  la section efficace moyenne proton-nucléon),  $\xi = \Lambda/\lambda/10$  et enfin  $\Lambda/3\beta$  représente le rapport entre la durée d'une interaction et le temps entre deux interactions (il doit être strictement supérieur à 1). Figure tirée de (Yariv et al. 2008)

le domaine de validité du modèle. La méthode de type Monte-Carlo consiste à générer un maximum d'événements permettant de simuler l'expérience. Chaque événement correspond à la collision d'une particule incidente sur un noyau cible. Il comprend une phase d'initialisation (projectile et noyau), le suivi des particules du système formé avec le transport des particules et le traitement des *avatars*<sup>5</sup> (collision, réflexion ou transmission à la surface du noyau, etc.), l'application du critère d'arrêt de la cascade et la définition des noyaux résiduels (masse, charge, énergie d'excitation, etc.) qui serviront au code de désexcitation.

Sans vouloir énumérer les ingrédients utilisés dans tous les codes de cascade intranucléaires, je donne ci-dessous les principaux.

### Initialisation

- projectile - Le type de la particule et son énergie sont des données fixées du problème. Il faut définir son paramètre d'impact. Ceci est généralement fait de manière aléatoire, avec prise en compte ou non de la déviation coulombienne due à la charge du noyau cible. Lorsque la particule entre dans le noyau, son énergie est modifiée du potentiel nucléaire. Si la particule est composite il peut arriver que certains de ces nucléons entrent dans le noyau et d'autres non. Sa structure interne doit aussi être initialisée, comme pour le noyau cible.
- noyau cible - D'une manière générale le noyau est décrit par une distribution de densité de ses nucléons, de type Woods-Saxon par exemple, et par une distribution de type gaz de Fermi pour les impulsions qui dépendent alors de la position dans le noyau. La distribution en position peut être continue (souvent représentée par des régions concentriques de densités différentes) ou

5. Terme choisi par A. Boudard, co-développeur du code INCL4, pour définir spécifiquement les événements potentiels auxquels les particules, présentes lors de la cascade, sont sujettes.

discrète (à chaque nucléon est affecté une position tirée dans la distribution de densité) suivant la méthode utilisée pour le suivi du processus.

### Transport

Deux méthodes de suivi du processus existent. Le suivi qui correspond aux distributions continues de la densité du noyau et qui se fait par pas de temps, c'est le suivi en temps, et le suivi qui correspond aux distributions discrètes et qui se fait par un critère de distance minimale d'approche, c'est le suivi en espace.

- Suivi en temps - Le transport du projectile, et ensuite de toutes les particules dont l'histoire a été affectée de près ou de loin par le projectile, se fait par pas de temps à l'issue desquels des probabilités de collisions (P)<sup>6</sup> avec les nucléons de la mer de Fermi sont calculées. S'il y a une collision, le nucléon sort de la mer de Fermi et les produits de la réaction, devenant participants, sont définis en type et moment. Le blocage de Pauli est testé pour finir de valider la réaction ou non. Les trajectoires sont des lignes droites avec prise en compte ou non de la réfraction au passage des différentes régions en densité.
- Suivi en espace - Toutes les particules ont des lignes droites pour trajectoires. Le transport s'effectue jusqu'à ce qu'une distance minimale d'approche (d)<sup>7</sup> indique qu'une collision est possible. Les produits de la réaction sont définis et le test du blocage de Pauli effectué pour valider ou non la réaction.

### Avatars

Les principaux événements qui peuvent se passer lors de la cascade, et que nous appelons avatars, sont les suivants.

- Collisions - Les collisions peuvent être élastiques ou inélastiques et sont en général basées sur des données expérimentales pour décider du type d'interaction qui va avoir lieu et pour définir les caractéristiques des produits sortants (tirages aléatoires). Si le blocage de Pauli est pris en compte dans tous les modèles, la façon de le faire peut différer notamment, mais pas exclusivement, du fait d'une représentation continue ou discrète de la densité nucléaire. Le nombre et le type de collisions dépendent de chaque modèle.
- Décroissance de la  $\Delta$  - Parmi les produits de collisions il existe la résonance  $\Delta$  que les modèles doivent prendre en compte dès que l'énergie incidente dépasse environ 300 MeV pour un nucléon. Cette résonance peut interagir comme nouvelle participante, mais aussi elle peut décroître. Le test du blocage de Pauli peut aussi être appliqué dans ce cas. D'autres résonances peuvent être prises en compte, mais ce n'est pas systématique.
- Réflexion/Transmission - Arrivée à la surface du noyau une particule peut soit être transmise, i.e. émise, soit être réfléchi, i.e. revenir dans le noyau. Lorsque la particule est émise son énergie est modifiée du potentiel nucléaire, comme pour le projectile entrant. De même une déviation coulombienne peut-être prise en compte ou non.

6.  $P(\delta\tau) \approx \rho\sigma v\delta\tau$ , où  $\delta\tau$  est le pas de temps,  $\rho$  la densité locale,  $\sigma$  la section efficace de diffusion des deux particules en jeu et  $v$  leur vitesse relative.

7.  $d = \sqrt{\sigma(E_{cm})}/\pi$  où  $\sigma$  est la section efficace de diffusion des deux particules en jeu et  $E_{cm}$  l'énergie dans le centre de masse du système des deux particules.

### Critère d'arrêt

Il existe principalement deux critères d'arrêt : une énergie seuil et un temps d'arrêt de la cascade. L'énergie seuil est une énergie en deçà de laquelle toute particule participante redevient spectatrice, son énergie étant convertie en énergie d'excitation. Dans ce cas la cascade s'arrête lorsqu'il n'y a plus de participants (les uns redevenus spectateurs et les autres émis). Le temps d'arrêt est une durée prédéfinie de la cascade qui peut dépendre par exemple de la masse du noyau cible. La définition de ce temps est basée sur les caractéristiques du mécanisme en cours, comme par exemple le fait que le moment moyen des particules devienne nul, ce qui montre que le noyau a perdu la mémoire de sa formation et qu'un autre mécanisme, par exemple une désexcitation statistique, peut alors s'appliquer. Dans les deux cas cela traduit le passage entre les deux mécanismes en oeuvre, à savoir la phase rapide avec les réactions entre particules et la phase lente de désexcitation d'un noyau composé.

### 1.2.2 Seconde étape : la désexcitation (phase lente)

Lorsque le noyau a perdu la mémoire de sa formation (la somme des moments des particules le composant s'annule), il peut alors être traité comme un noyau composé et sa désexcitation ne dépend plus que de ses caractéristiques (masse, charge, énergie d'excitation, moment angulaire). Dans le domaine de la spallation les principales voies de désexcitation sont l'évaporation de particules et la fission pour les noyaux lourds. Pour des projectiles assez énergétiques et/ou des noyaux cibles de petite masse on peut voir apparaître la production de petits noyaux, fragments dits de masses intermédiaires. Plusieurs voies sont proposées pour leur formation, suivant les cas : l'évaporation étendue, la cassure binaire, la multifragmentation, le Fermi breakup. Je donne ci-après les principales caractéristiques de ces voies avec les ingrédients qui peuvent être différents suivant les modèles.

#### Évaporation

L'évaporation consiste en l'émission de particules. Ces particules emportent avec elles une fraction d'énergie sous forme cinétique, corrigée des différences de masse. Aussi, comprendre le mécanisme de l'évaporation, c'est être capable de savoir : i) quel type de particule est émis ou plus exactement la proportion entre chaque type, ii) combien de ces particules sont émises et par type, et iii) quels sont les spectres en énergie des particules émises. Pour répondre à ces questions il faut en fait connaître la probabilité d'émission de chacun des types de particules en fonction de l'énergie cinétique emmenée.

Pour calculer cette probabilité on fait les hypothèses de base suivantes :

- le noyau est suffisamment excité pour pouvoir appliquer une description statistique, et
- le taux d'émission est égal au taux d'absorption (principe de la balance détaillée ou notion de réversibilité).

Muni de ces hypothèses on met en équation le problème pour en tirer la probabilité d'émission. Si on écrit que le taux d'émission est égal au taux d'absorption, sachant que ces taux sont le produit d'une densité d'état et d'une probabilité de réaction, on obtient une équation où apparaissent les densités d'état dans le cas de l'émission et dans celui de l'absorption, et les probabilités d'émission et d'absorption (ou capture). La figure 1.4 donne une vue schématique de l'équation.

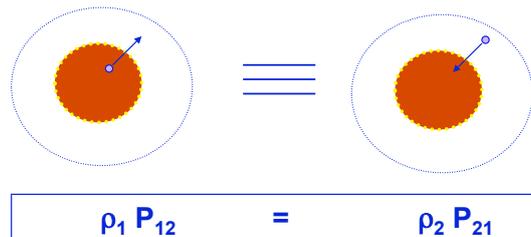


FIGURE 1.4 – Schématisation du principe de la balance détaillée avec  $\rho_1$  la densité d'état dans l'état initial (noyau),  $P_{12}$  la probabilité d'émettre une particule,  $\rho_2$  la densité d'état dans l'état final (noyau+particule) et  $P_{21}$  la probabilité de capturer une particule

Si maintenant on exprime chacune de ces variables en fonctions d'autres ingrédients que l'on connaît ou cherche :

- $\rho_i(E_i^*)$ , la densité d'état en fonction de l'énergie du noyau excité initial,
- $P_a(\varepsilon)$ , la probabilité d'émission par unité de temps et d'énergie que l'on cherche en fonction de  $\varepsilon$  l'énergie de la particule émise,
- $\rho_f(E_f^*)$ , la densité d'état du noyau final (après émission de la particule) ,
- $(4\pi p^2 dp/h^3) Vol$ , l'espace de phase de cette particule émise d'impulsion  $p$  et dans un volume  $Vol$
- $s$ , le spin de la particule émise,
- $\sigma_c(\varepsilon)$ , la section efficace de capture de la particule par le noyau, et
- $vit$ , la vitesse de la particule qui intervient par le flux ( $= vit/Vol$ ),

on obtient :

- $\rho_1 = \rho_i(E_i^*)$ ,
- $P_{12} = P_a(\varepsilon)$ ,
- $\rho_2 = \rho_f(E_f^*)(2s + 1)(4\pi p^2 dp/h^3) Vol$ ,
- $P_{21} = (\sigma_c(\varepsilon) vit)/Vol = (\sigma_c(\varepsilon) d\varepsilon/dp)/Vol$ ,

et pour finir l'expression de  $P_a(\varepsilon)$  que l'on cherche

$$P_a(\varepsilon) = \frac{\rho_f(E_f^*)}{\rho_i(E_i^*)} (2s + 1) (4\pi p^2 dp/h^3) \sigma_c(\varepsilon) \quad (1.12)$$

Pour décider quel type de particule sera émise il suffit alors d'intégrer sur l'énergie ces probabilités et de procéder à un tirage aléatoire.

Ce résultat est connu depuis très longtemps, mais ce qui fait encore la différence entre les modèles ce sont les ingrédients utilisés. Les deux ingrédients principaux sont la densité d'état d'un noyau en fonction de son énergie d'excitation ( $\rho(E^*)$ ) et la section efficace de capture d'une particule par un noyau en fonction de l'énergie de cette particule ( $\sigma_c(\varepsilon)$ ).

On a déjà dit que l'on supposait le noyau assez excité, avec donc un grand nombre d'états possibles, pour pouvoir utiliser une approche statistique de la désexcitation. Bien que l'énergie d'excitation soit connue, la représentation canonique est utilisée à la place de la micro-canonique pour simplifier le formalisme et apparaît alors le paramètre de densité de niveau  $a$ , reliant l'énergie d'excitation à la température  $T$ <sup>8</sup> du noyau,  $E^* = aT^2$ . Dans la plupart des cas on utilise pour expression de la densité d'états le modèle du gaz de fermi, avec, pour hypothèse, des

8. Pour rappel, la définition de la température est  $\frac{1}{T} = \frac{\partial \ln \rho}{\partial E}$  et  $a = \frac{\partial \ln Z}{\partial T}$ , où  $Z$  est la fonction de partition

Date	Auteur(s)	Objectifs	Expressions/Valeurs
1937	Weisskopf (1937)	Ordre de grandeur	$5MeV^{-1} < a < 20MeV^{-1}$
1965	Gilbert et Cameron (1965)	Effets de paire (P) et de couche (S)	$E^* \Rightarrow E^* - P$ $a/A = 0,00917S + (0,142 \text{ ou } 0,120)$
1975	A.V.Ignatyuk et al. (1975)	Effets de couche en fonction de $E^*$	$a/A = \frac{1}{6,494}(1 - 0,00041A)$ $\left[1 - (1 - e^{(-0,054E^*)})(\delta W/E^*)\right]$ avec $\delta W$ : effet de couche
1975	A.V.Ignatyuk et al. (1976)	Effet de déformation ( $\check{S}$ ) du noyau	$a/A = \frac{1}{13,70}(1 - 1,30A^{-1/3}\check{S})$ $\left[1 - (1 - e^{(-0,054E^*)})(\delta W/E^*)\right]$
1981	Toke et Swiatecki (1981)	Surface diffuse du noyau	$a/A = \frac{1}{14,61}\left(1 + \frac{3,114}{A^{1/3}} + \frac{5,626}{A^{2/3}}\right)$
1982	Schmidt et al. (1982)	Effets de paire/couche méthode ab initio	Retrouve les formules d'Ignatyuk
1988	Guet et al. (1988)	Effet de la forme, volume et surface	$a/A = \frac{1}{18,87}\left(1 + \frac{1,797}{A^{1/3}} + \frac{1,049}{A^{2/3}}\right)$
1991	Shlomo et Natowitz (1991)	Fonction de la température	Dans le domaine de la spallation, négligeable
1998	Junghans et al. (1998)	Effets collectifs	variante de (Schmidt et al. 1982), cf. section 1.4.1

TABLE 1.1 – Différentes expressions et valeurs du paramètre de densité de niveau  $a$  à travers les âges.

niveaux équidistants au niveau de fermi, là où se situe l'excitation. L'expression souvent utilisée dans le domaine de la spallation ne tient pas compte du moment angulaire et s'écrit

$$\rho(E^*) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^{2\sqrt{aE^*}}}{a^{1/4} E^{*5/4}}, \quad (1.13)$$

mais si on prend en compte le moment angulaire  $J$  alors

$$\rho(E^*, J) = (2J + 1) \left(\frac{\hbar^2}{2I}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{a} e^{2\sqrt{aU}}}{12 U^2}, \quad (1.14)$$

où  $I$  est le moment d'inertie du noyau et  $U$  l'énergie d'excitation des nucléons, soit  $U = E^* - E_{rot}$ , c'est à dire l'énergie d'excitation disponible décomptée de l'énergie de rotation  $E_{rot}$ .

On voit bien alors que reste à déterminer le paramètre de densité de niveau  $a$ . Du comptage des résonances pour tirer un ordre de grandeur (Weisskopf 1937) à la prise en compte de la masse du noyau, des effets de paire, de couche, des dépendances avec l'énergie d'excitation, avec la température, etc., les expressions pour ce  $a$  ne manquent pas et beaucoup d'études y ont été consacrées. Le tableau 1.1 illustre juste quelques-uns seulement de ces travaux.

Le second ingrédient fondamental pour la détermination de la largeur ou probabilité d'émission d'une particule est la section efficace de capture en fonction de son énergie  $\varepsilon$ . Là encore les expressions sont diverses, aussi je ne mentionne ci-après que les grandes lignes.

La formulation la plus simple est celle que Weißkopf utilisait en 1937 (Weißkopf 1937) en ne prenant en compte que la barrière coulombienne  $B_{coul}$  des particules chargées

$$\sigma_c(\varepsilon) = \pi R^2 \left(1 - \frac{B_{coul}}{\varepsilon}\right), \quad (1.15)$$

avec  $R$  le rayon du noyau.

La formulation de Weißkopf-Ewing en 1940 (Weißkopf et Ewing 1940) est plus précise. Elle prend en compte le moment angulaire par une décomposition en onde partielle ce qui revient à écrire la section efficace

$$\sigma_c(\varepsilon) = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) Q_l(\varepsilon), \quad (1.16)$$

où  $k$  est le nombre d'onde,  $l$  le moment angulaire. Weißkopf et Ewing décomposent leur facteur  $Q_l(\varepsilon)$  en deux. Une partie liée à l'onde entrante, c'est  $P_l(\varepsilon)$ , appelé facteur de pénétration (aptitude à atteindre la surface du noyau), et une autre partie liée à la probabilité d'échange d'énergie entre la particule et le noyau, c'est  $\xi_l(\varepsilon)$ , appelé facteur d'accrochage. Ils donnent pour  $P_l(\varepsilon)$  des expressions suivant que la particule est neutre ou chargée. On retrouve la barrière pour les particules chargée (en fait ici c'est à la fois la barrière coulombienne et la barrière centrifuge). La valeur de  $\xi_l(\varepsilon)$  n'est pas accessible, seule sa valeur moyenne sur les  $l$  l'est. L'expérience donne des valeurs ou comportements suivant l'énergie.

La formulation d'Hauser-Feshbach (Hauser et Feshbach 1952) est très semblable

$$\sigma_c(\varepsilon) = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) T_l(\varepsilon), \quad (1.17)$$

le facteur  $Q_l(\varepsilon)$  est remplacé par le facteur de transmission  $T_l(\varepsilon)$ . Ce sont bien sûr les expressions que prennent ce facteur  $T_l(\varepsilon)$  qui ont évolué. On peut donner la formulation suivante

$$t_l(\varepsilon) = e^{2 \int \sqrt{2 \frac{\mu}{\hbar} [V(l,r) - \varepsilon]} dr}, \quad (1.18)$$

avec

$$T_l(\varepsilon) = \frac{1}{1 - t_l(\varepsilon)}, \quad (1.19)$$

et où  $\mu$  est la masse réduite du système et  $V(l, r)$  le potentiel prenant en compte le potentiel coulombien, le potentiel centrifuge et le potentiel nucléaire. Si le potentiel centrifuge est clairement connu et le potentiel coulombien aussi, même si des raffinements existent, le potentiel nucléaire est plus compliqué et différentes expressions existent comme celles de Huizenga (Huizenga et Igo 1962) ou de Bass (Bass 1974).

De tout ceci il ressort que le formalisme de l'évaporation est bien posé, mais que les expressions de ses ingrédients peuvent varier et expliquer des différences dans les résultats suivant les modèles. On peut noter aussi que l'évaporation des particules peut être étendue à l'évaporation de noyaux légers. Dans ce cas les hypothèses de base, comme le principe de la balance détaillée, sont moins justifiées et la validation a posteriori semble nécessaire.

## Fission

Pour des noyaux lourds excités il existe un phénomène qui peut entrer en compétition avec l'évaporation : la fission. In fine, pour le prendre en compte, il faut

être capable de calculer la largeur de fission pour obtenir la probabilité de fission  $P_f = \frac{\Gamma_f}{\Gamma_f + \Gamma_{evap}}$ , où  $\Gamma_{evap}$  est la somme des largeurs d'évaporation de tous les types de particules considérées, et de définir les caractéristiques des fragments émis. S'il n'est nullement question ici d'aborder dans le détail la description de la fission en jeu dans les réactions de spallation, je donne juste quelques paramètres et phénomènes qui gouvernent le processus pour essayer de mettre une fois encore le doigt sur l'important et le délicat.

Il faut remarquer d'abord que la fission qui nous importe ici est de la fission de haute énergie comparativement à la fission thermique ou rapide des réacteurs nucléaires. De ce fait les effets de couche existants pour la fission de basse énergie deviennent négligeable dans la fission de haute énergie, et une des conséquences est que la distribution en masse (charge) des fragments de fission n'est pas asymétrique, mais symétrique, et ce d'autant plus que l'énergie d'excitation est grande.

La fission est un résultat de la compétition entre l'énergie coulombienne (répulsive) et l'énergie de surface (attractive) du noyau. Lorsque l'énergie d'excitation augmente la déformation du noyau devient plus importante et le nombre de configurations favorisant la fission s'accroît. De ceci ressort un paramètre important donc, la fissilité, qui est ce rapport entre les énergies coulombienne et de surface. La première étant en  $Z^2/A^{1/3}$  et la seconde en  $A^{2/3}$ , la fissilité est proportionnelle à  $Z^2/A$ .

Le moment angulaire, s'il est plus faible dans les réactions de spallation que dans celles entre ions lourds, n'est pas négligeable dans le cas de la fission. Il abaisse la barrière de fission par une déformation plus importante. L'article de référence sur le sujet est celui de Sierk (Sierk 1986).

La fission, contrairement à l'évaporation, est un phénomène collectif. De plus, pour passer d'un état à degrés de liberté individuels à un état à degrés de liberté collectifs il faut du temps, le temps de transition pour atteindre le moment où la décision de fissionner est prise, le point selle. Le mouvement aléatoire de particules dans un milieu dissipatif est géré par les équations de Langevin ou de Fokker-Planck. Si les équations stationnaires sont solubles analytiquement, les équations dynamiques ne le sont pas toujours et nécessitent de long temps de calcul. Une conséquence de l'existence de ce temps de transition est que l'option fission ne s'ouvre pas immédiatement, mais progressivement, et ce retard doit donc être pris en compte si l'on veut une bonne compétition évaporation/fission. Un autre temps existe, c'est celui qui s'écoule entre le point selle et le point de scission, moment où les deux fragments se séparent. Pendant ce temps des particules peuvent éventuellement être émises.

Ainsi, pour revenir au calcul de la probabilité de fission, il faut calculer la largeur de fission en tenant compte des remarques précédentes. Reprenant les équations 1.12 et 1.17 et intégrant sur les énergies de la particule émise on obtient la largeur d'évaporation d'une particule  $a$  (dans le cas où on néglige la dépendance avec le moment angulaire et où  $B_a$  est la barrière coulombienne dans le cas d'une particule chargée)

$$\Gamma_a(E^*) = \frac{1}{2\pi\rho_i(E^*)} \int_0^{E^* - B_a} \rho_f(E^* - B_a - \varepsilon) T_i(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (1.20)$$

Pour la fission Bohr et Wheeler proposèrent d'utiliser la même méthode statistique que pour l'évaporation, cependant en ne considérant pas les états finaux, c'est à dire ceux des fragments de fission, mais les états du noyau au moment où la décision de fissionner se prend, i.e. le point selle. L'expression de la largeur de Bohr-Wheeler

est alors

$$\Gamma_{BW}(E^*, J) = \frac{1}{2\pi\rho_i(E^*, J)} \int_0^{E^* - B_f(J)} \rho_{selle}(E^* - B_f(J) - \varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.21)$$

où  $B_f(J)$  est la barrière de fission qui dépend du moment angulaire.

Comme il a été dit plus haut, la fission est un phénomène collectif. H.A. Kramers (Kramers 1940) en résolvant l'équation stationnaire de Fokker-Planck aboutit à la réduction de la largeur de Bohr-Wheeler par le facteur  $K$  égal à  $\sqrt{1 + \left(\frac{\beta}{2\omega_0}\right)^2} - \left(\frac{\beta}{2\omega_0}\right)$ , où  $\beta$  est le facteur de dissipation et  $\omega_0$  la fréquence d'un oscillateur harmonique sondant la barrière de fission. Pour faire apparaître explicitement le temps de transition amenant la largeur à sa valeur asymptotique il faut résoudre alors l'équation de Fokker-Planck dynamique.

La caractérisation des fragments de fission est plus phénoménologique. Si l'énergie cinétique de chacun est basée sur leur répulsion coulombienne, l'ajustement sur des données expérimentales est souvent de mises. L'aide de données expérimentales est aussi utilisé pour la détermination des masses et charges en supposant souvent des distributions gaussiennes et en prenant soin de conserver la masse et la charge totale. Pour les énergies d'excitation, la distribution dans le rapport des masses est fréquemment faite.

### Cassure binaire

L'évaporation de particules et la fission symétrique de haute énergie permet de reproduire quasiment toute les distributions en charge ou masse, excepté pour les noyaux de masses intermédiaires. On a mentionné à la fin de la description de l'évaporation que le formalisme pouvait être étendu à ce type de noyau, moyennant a minima la prise en compte de leur énergie d'excitation. Un autre formalisme pour modéliser la création de ces noyaux est l'extension de la cassure binaire. L'évaporation peut être vue comme une cassure binaire extrêmement asymétrique et la fission de haute énergie comme une cassure binaire symétrique. Pour Moretto (Moretto 1975, Moretto et Wozniak 1988), [...], *there is no need to consider the two extremes of this distribution as two independent processes. Rather, one would conclude, fission and evaporation are the two, particularly (but accidentally) obvious extremes of a single statistical decay process, the connection being provided in a very natural way by the mass asymmetry coordinate*. Il a alors généralisé le modèle de fission de Bohr-Wheeler en ajoutant une dimension supplémentaire : l'asymétrie de masse. L'expression de la largeur de désintégration pour cette cassure binaire est

$$\Gamma_y(E^*, J) dy = \frac{1}{2\pi\rho_i(E^*, J)} \int_0^{E^* - B_f(J)} \int \frac{dy dp_y}{h} \rho_{selle}(E^* - B(J, y) - \frac{p_y^2}{2m_y} \varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.22)$$

où  $y$  est l'asymétrie de masse,  $p_y$  son moment conjugué et  $m_y$  l'inertie associée.

De manière à simplifier l'expression de cette largeur, d'autres expressions ont été proposées (Charity 2008), où la dépendance à l'asymétrie de masse est contenue dans la barrière de fission. Ainsi dans le code GEMINI on a

$$\Gamma_{Z,A}(E^*, J) = \frac{1}{2\pi\rho_i(E^*, J)} \int_0^{E^* - B_f(J)} \rho_{selle}(E^* - B_{Z,A}(J) - \varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.23)$$

où  $B_{Z,A}(J) = B_A(J) + \Delta M + \Delta E_{coul} - \delta W - \delta P$ .

$\Delta M$  et  $\Delta E_{coul}$  sont les corrections de masse et d'énergie coulombienne venant de l'asymétrie de masse,  $\delta W$  et  $\delta P$  étant respectivement les effets de couche et de paire.

Dans la pratique, et pour de meilleurs résultats, les formalismes de l'évaporation et de la fission sont conservés et celui de la cassure binaire étendue (ou cassure binaire) pour l'émission de noyaux de masses intermédiaires entre en compétition avec eux.

### Multifragmentation

Lorsque l'énergie d'excitation augmente des noyaux de masses intermédiaires apparaissent. Nous avons précédemment mentionné que leur production pouvait être prise en compte par une évaporation étendue, c'est à dire au-delà de l' $\alpha$  ou par une cassure binaire généralisée, i.e. fission très asymétrique, pont entre l'évaporation et la fission. Un autre processus physique avancé est la multifragmentation, c'est à dire l'éclatement du noyau cible en plusieurs noyaux avant sa mise en équilibre thermique. L'idée de l'utilisation de ce nouveau formalisme vient notamment du temps de mise à l'équilibre du noyau excité entre deux émissions successives. Ce temps de relaxation deviendrait comparable aux intervalles de temps d'émission pour des énergies d'excitation par nucléon supérieures à environ 3 MeV et donc les modèles basés sur un noyau en équilibre thermique ne se justifieraient plus. Ce temps de relaxation est égal à  $2R/c_s$ , où  $R$  est le rayon du noyau et  $c_s$  la vitesse du son dans le noyau. Une partie du raisonnement est donc basée sur ce dernier paramètre dont l'on peut trouver des estimations dans l'article (Su et al. 1988).

Pour traiter cette multifragmentation différents types de modèles ont été élaborés et l'on retrouve, entre autres, d'après un classement de Bondorf (Bondorf et al. 1995), les modèles TDHF et QMD pour la dynamique microscopique et BUU/VUU pour les modèles cinétiques. Une autre modélisation est privilégiée dans le cas de la spallation pour les fortes énergies d'excitation, donc grand nombre de degrés de liberté : l'approche statistique.

Sans entrer du tout dans les détails, le modèle statistique cherche à donner un poids à chaque partition du système pour ensuite en choisir une. Comme toujours l'on peut choisir les ensembles microcanoniques, canoniques ou grand canonique suivant nos connaissances du système, des approximations envisageables et du temps nécessaire à la réalisation. Ainsi, prenant le cas du modèle SMM (Botvina 2008), le nombre de partitions devenant vite énorme (Pour 100 nucléons,  $\sim 2.10^8$ , et pour 200,  $\sim 4.10^{12}$ , (Botvina et al. 2000)), des simplifications, basées sur des constatations physiques, sont faites. Pour les énergies d'excitation faibles l'ensemble microcanonique est utilisé, mais en ne considérant que les multiplicités inférieures ou égales à 3. Pour les hautes énergies d'excitation l'ensemble grand canonique est considéré, car le nombre de partitions devient trop grand. Le choix de la partition est basé sur les poids statistiques (éq.1.24) dans le premier cas

$$\text{poids statistique} \propto e^{\mathcal{S}_p}, \quad (1.24)$$

avec  $S_p$  l'entropie, dont l'expression donnée par (Botvina 2008) est

$$S_p = \ln \left( \prod_{A,Z} g_{A,Z} \right) + \ln \left( \prod_{A,Z} A^{3/2} \right) - \ln (A_0^{3/2}) - \ln \left( \prod_{A,Z} n_{A,Z}! \right) + \quad (1.25)$$

$$(M-1) \ln \left( \frac{V_f}{\lambda_{T_p}^3} \right) + 1.5 (M-1) + \sum_{A,Z} \left( \frac{2T_p}{E_0} - \frac{\partial F_{A,Z}^S(T_p)}{\partial T_p} \right),$$

et sur les multiplicités moyennes de fragments de masse  $A$  et charge  $Z$  dans le second cas,

$$\langle n_{A,Z} \rangle = g_{A,Z} \frac{V_f}{\lambda_{T_p}^3} A^{3/2} e^{[-\frac{1}{T}(F_{A,Z}(T,V)) - \mu A - \nu Z]}. \quad (1.26)$$

Ces poids statistiques et multiplicités moyennes sont fonction de plusieurs variables<sup>9</sup> dont l'énergie libre  $F_{A,Z}$ , mais aussi d'un paramètre  $V_f$  relié au volume de *freeze-out*  $V$  par  $V = V_0 + V_f$ , où  $V_0$  est le volume du système à densité nucléaire normale. Ce volume correspond à la configuration du noyau où celui-ci ne ressent plus que les forces coulombiennes et donc n'est plus maintenu par les forces nucléaires. C'est de ce volume de *freeze-out*, après y avoir été positionnés de manière aléatoire, que les fragments se dispersent par répulsion coulombienne.

Ensuite les différents fragments pourront à leur tour subir une désexcitation, évaporation et/ou fission pour les plus lourds et, pour les plus légers et dans certains modèles, une autre voie abordée ci-après, le Fermi breakup.

### Fermi breakup

Le Fermi breakup, comme son nom l'indique, est à l'origine une méthode développée par E. Fermi pour expliquer l'émission multiple de  $\pi$  lors d'événements nucléaires de haute énergie<sup>10</sup> (Fermi 1950). Il considéra que le grand nombre d'états possibles du système amenant à la production multiple de pions justifiait une approche statistique et que la probabilité d'occurrence d'une voie donnée était égale à son poids statistique (éq.1.27). Cette méthode a ensuite été utilisée pour les noyaux légers fortement excités (Épherre et Gradsztajn 1967), puisque les hypothèses étaient les mêmes.

$$\text{poids statistique} = \left( \frac{V}{8\pi^3 \hbar^3} \right)^{n-1} \rho_n(E), \quad (1.27)$$

où  $n$  est le nombre de composantes (particules) dans l'état final,  $\rho_n(E)$  la densité d'états finaux fonction de l'énergie cinétique totale finale et  $V$  le volume de désintégration (souvent pris égal au volume correspondant à la densité nucléaire normale).

Une fois la voie de désintégration choisie, il reste à assigner à chaque produit émis son moment cinétique venant de la répulsion coulombienne, comme dans le cas de la multifragmentation.

On voit bien que le Fermi-breakup et la description statistique de la multifragmentation reposent sur le même principe, un calcul de toutes les partitions possibles et un tirage aléatoire suivant les probabilités de chacune. De plus elles font

9.  $g_{A,Z}$  est la dégénérescence de spin,  $n_{A,Z}$  le nombre de fragments de masse  $A$  et de charge  $Z$  dans la partition,  $A_0$  la masse du système,  $M$  la multiplicité de fragments,  $\lambda_{T_p}$  la longueur d'onde du nucléon fonction de la température,  $E_0$  l'énergie d'excitation du système et  $\mu$  et  $\nu$  les potentiels chimiques

10. comprendre ici la haute énergie de l'époque, c'est à dire quelques centaines de MeV.

intervenir toutes les deux le volume où se passe l'explosion, même si dans le cas originel de Fermi ce n'était pas un volume de *freeze-out*. Récemment une étude (Carlson et al. 2011), avec pour but de fusionner les modèles de Fermi-breakup et de multifragmentation statistique basée sur l'ensemble microcanonique, a montré que cela était possible à condition notamment d'avoir ce volume source équivalent, ce qui n'est pas toujours le cas.

### 1.3 LA CASCADE INTRANUCLÉAIRE DE LIÈGE : INCL

Le code INCL décrit la première phase de la spallation par l'*approche recherche*. Sa première version date d'il y a plus de trente ans et était en fait dédiée aux collisions d'ions lourds (Cugnon et al. 1981; 1982). En 1987 apparaît une variante particule-noyau qui sera régulièrement améliorée (Cugnon 1987). Je décrirai ici la version INCL4.2 de 2002 (Boudard et al. 2002) qui a été implantée dans les codes de transport de particules LAHET3.16 (Prael 2001) et MCNPX2.5.0 (Hendricks et al. 2005), ainsi que les améliorations et ajouts de la version INCL4.5<sup>11</sup>, utilisée lors du *Benchmark of spallation models* de 2010 discuté dans le chapitre 2, section 2.2 (page 57). Je donne ci-dessous les différentes phases et ingrédients de INCL4 sans entrer dans les détails que les personnes intéressées trouveront dans les références données. Le but est à la fois de décrire le modèle pour entrer un peu plus en profondeur dans un code de cascade intranucléaire, de saisir la physique, les hypothèses et donc le champs d'action d'INCL4, et ainsi d'avoir les bases pour les discussions des chapitres suivant traitant de la qualité et des domaines de validité des codes (chapitre 2), ainsi que des applications qu'on en a faites (chapitre 3).

#### 1.3.1 Préparation de la cible

Le noyau est fait de nucléons distribués aléatoirement en position et en moment. La forme de la distribution en espace dépend de la masse  $A$  du noyau :

$A > 27$	Woods-Saxon,
$27 > A > 6$	Oscillateur harmonique modifié,
$6 > A$	Gaussienne.

Ces formes et les paramètres utilisés sont tirés de mesures de diffusion d'électrons. Les distributions en moment sont tirés dans une sphère de rayon le moment de Fermi  $p_F = 270 \text{ MeV}/c$ . Une caractéristique importante apparue avec la version 4.2 est la surface diffuse du noyau, qui a permis notamment d'obtenir les bonnes sections efficaces de réaction.

Les nucléons sont considérés comme se déplaçant librement dans un puits de potentiel. De ce fait ils ne se trouvent pas tous sur les mêmes niveaux d'énergie et n'ont pas le même rayon d'action. Les positions possibles d'un nucléon dans le noyau sont restreintes à un rayon  $R$  dépendant de son moment. Cette corrélation est prise en compte en tirant d'abord les moments  $p$ , puis les positions dans un sphère de rayon  $R(p)$ . Il n'est pas imposé d'avoir une distribution parfaitement

11. Entre le début et la fin de la rédaction de ce mémoire une version améliorée, INCL4.6 (article soumis à Phys. Rev. C) a été mise au point. La principale différence avec 4.5 est le traitement des projectiles de basses énergies et surtout des projectiles composites (voir par exemple la figure 3.29 page 116)

isotrope en position, moment et moment angulaire. Cependant sur l'ensemble des événements cela est parfaitement vérifié.

Dans la version 4.2 le potentiel des nucléons était constant et le même pour les protons et neutrons. Dans la version 4.5, non seulement on dissocie les protons et les neutrons, mais le potentiel est aussi fonction de l'énergie (Aoust et Cugnon 2004). De plus dans la version 4.5 les pions voient un potentiel non nul dépendant de l'isospin (Aoust et Cugnon 2006).

### 1.3.2 Préparation du projectile

Le projectile est d'abord caractérisé par son type (neutron, proton, pion, deuton, triton,  $^3He$  ou  $\alpha$ ) et son énergie cinétique. Il faut ensuite lui assigner un paramètre d'impact  $b$ . Ceci est fait de manière aléatoire dans un cercle de rayon  $b_{max} = R_0 + 8a$  où  $R_0$  et  $a$  sont le rayon et la diffusivité de la densité nucléaire de la cible. Cette valeur de  $b_{max}$  est un optimum entre le résultat et le temps de calcul. Une fois le nucléon ou le pion à la surface, et donc entrant dans le noyau, son énergie est corrigée du potentiel qu'il ressent.

Lorsque la particule est composite (deuton, triton,  $^3He$  ou  $\alpha$ ), il faut en premier lieu la *construire* comme on a construit le noyau cible. Une position et un moment est assigné à chacun des nucléons la constituant. Dans ce cas-ci l'isotropie des moments est imposée. La contraction de Lorentz est prise en compte avant l'arrivée sur la surface du noyau cible. Le  $b_{max}$  vaut dans ce cas  $R_0 + 8a + rms$  où  $rms$  est le rayon carré moyen de la distribution gaussienne en position. Il se peut que certains nucléons n'entrent pas dans le noyau du fait du paramètre d'impact et de leurs moments. Dans ce cas ils n'entrent donc pas dans le jeu de la cascade et sont considérés comme nucléons libres. Il n'y a pas agrégation des nucléons libres.

Dans la version 4.5 la déviation coulombienne du projectile est prise en compte. Si pour le nucléon et le pion la trajectoire subit une réelle déformation, pour les particules composites cette déviation est prise en compte a posteriori, en corrigeant la section efficace de réaction<sup>12</sup>.

### 1.3.3 Propagation

Toutes les particules du système (nucléons du noyau cible, particules entrantes et particules produites au cours de la cascade) se propagent en ligne droite en gardant le même moment. Ainsi on peut connaître la position de toutes les particules à tout moment. La propagation est stoppée lorsqu'un événement dans le noyau se passe (on l'appelle *avatar*, terme mentionné dans la note de bas de page 5, page 17). Les trois familles d'avatars sont : i) les interactions entre particules dont une au moins est participante, i.e. projectile ou ayant participé à un avatar (hors réflexion), ii) la désintégration de la résonance  $\Delta$  et iii) l'arrivée d'une particule à la surface du noyau ou du potentiel ressenti. Les définitions des avatars et des temps associés sont donnés ci-après dans la section 1.3.4.

La propagation continue ainsi de suite jusqu'à ce qu'un temps limite ait été atteint. Ce temps d'arrêt de la cascade est défini dans la section 1.3.6.

### 1.3.4 Avatars

Trois types d'avatars sont pris en compte :

12. Dans INCL4.6 cette déviation coulombienne est prise en compte dès le début.

- interaction ou collision entre deux particules,
- désintégration de la  $\Delta$ ,
- réflexion/transmission à la surface du noyau (ou du potentiel ressenti).

A chacun des avatars possibles est associé un temps et l'avatar associé au temps le plus petit est retenu. Si certaines contraintes, comme par exemple le blocage de Pauli (voir section 1.3.5, page 30), ne permettent pas d'accepter l'avatar, le second plus petit temps est choisi et ainsi de suite. Une fois un avatar accepté, toutes les particules sont déplacées du temps sélectionné et les produits de l'avatar définis.

### Collisions

Les collisions prises en compte dans INCL sont :

$$NN \rightarrow NN, NN \rightarrow N\Delta, N\Delta \rightarrow NN, N\Delta \rightarrow N\Delta, \Delta\Delta \rightarrow \Delta\Delta \text{ et } \pi N \rightarrow \Delta.$$

Pour toutes ces interactions la section efficace totale est calculée. Ces sections sont soit tirées de données expérimentales, soit paramétrées, soit obtenues à l'aide d'autres réactions et de l'utilisation des coefficients de Clebsh-Gordan ou du principe de la balance détaillée (Cugnon et al. 1996). Dans la gamme en énergie de la spallation les pions sont principalement produits via la  $\Delta(1232)$ . À ce sujet, si les sections efficaces totales  $\pi N$  sont aussi basées sur la  $\Delta(1232)$  dans INCL4.2, ce n'est plus le cas dans INCL4.5 où les autres  $\Delta$  sont prises en compte (voir Fig.27 de (Aoust et Cugnon 2006)).

Une collision est possible si elle vérifie le critère de distance minimale d'approche. Ces distances  $d_{min}$  entre deux particules sont aisément calculables considérant une propagation en ligne droite. Elles sont ensuite comparées à la portée de l'interaction  $\sqrt{\sigma_{tot}/\pi}$  et, si la distance minimale est inférieure à la portée, alors la collision est possible et son temps associé entrera en compétition avec les temps des autres avatars. On considère aussi que l'énergie dans le centre de masse des deux particules doit être supérieure à une valeur donnée de l'ordre de 1920 MeV (appelée  $cutNN$ ) pour éviter de prendre en compte des réactions de basses énergies qui seraient immanquablement bloquées par le principe de Pauli. Si les prendre en compte ne change en rien le résultat, le temps de calcul, lui, augmente inutilement.

Une fois la collision acceptée, les produits de la réaction sont définis en type, énergie et direction par tirages aléatoires basés sur des sections efficaces, des distributions angulaires ou de manière purement aléatoire comme l'angle  $\phi$ .

Si je ne donne pas ici tous les détails et difficultés qu'il faut résoudre pour obtenir une modélisation la plus fiable et cohérente possible, et qui sont expliqués dans (Boudard et Cugnon 2008), je mentionnerai rapidement à titre d'exemple le cas de la résonance  $\Delta$ . Pour la détermination de sections efficaces, comme  $N\Delta \rightarrow NN$ , via le principe de la balance détaillée, il faut prendre en compte son temps de vie, puisque, si ce dernier est de l'ordre de grandeur du temps de collision ou inférieur, la section efficace effective sera réduite du fait d'un flux de  $\Delta$  réduit. Un facteur correctif, basé sur l'absorption des pions (Cugnon et Lemaire 1988), est alors utilisé. De plus la masse affectée à la  $\Delta$  n'est pas celle du Particle Data Group booklet (Nakamura 2010), mais est tirée dans une distribution qui prend bien sûr en compte sa masse, mais aussi sa largeur et un facteur d'espace de phase prenant en compte le fait que la  $\Delta$  est un système  $\pi N$  de basse énergie. Les paramètres entrant alors en jeu ont été ajustés sur les données des réactions  $NN \rightarrow N\Delta$  (Cugnon et al. 1997).

### Décroissance de la $\Delta$

La  $\Delta$  ayant une durée de vie limitée, comparativement à la longueur de temps de la cascade, il faut prendre en compte sa décroissance,  $\Delta \rightarrow \pi N$ . Un des points important est la bonne valeur de son temps de vie. Si dans des versions précédentes INCL utilisait pour ce temps ( $\tau_\Delta$ ) l'inverse de la largeur de décroissance ( $\Gamma$ ) uniquement, dans INCL4.2 le facteur d'espace de phase mentionnée précédemment, prenant en compte le système  $\pi N$  de basse énergie vers lequel décroît la  $\Delta$ , est ajouté (éq. 1.28), ce qui a pour effet d'augmenter ce temps.

$$\tau_\Delta = \frac{\hbar q^3 + q_0^3}{\Gamma q^3}, \quad (1.28)$$

où  $q$  est le moment de transfert, moment relatif entre le pion et le nucléon sortants, et  $q_0$  un paramètre ajusté ( $q_0 = 180 \text{ MeV}/c$ ). Ce temps étant celui du référentiel propre de la  $\Delta$  il faut bien sûr prendre en compte le facteur de Lorentz  $\gamma$  pour revenir au noyau,  $\tau_\Delta \rightarrow \gamma \tau_\Delta$ .

Ainsi la décroissance est déterminée par un tirage aléatoire dans une loi de puissance fonction de ce temps  $\tau_\Delta$ . Il est à noter que ce temps a aussi un effet sur la section efficace de la réaction  $N\Delta \rightarrow NN$  obtenue par le principe de la balance détaillée, car il est de l'ordre de grandeur du temps de la collision, quelques unités de  $fm/c$ .

Les impulsions du  $\pi$  et du nucléon émis sont de directions opposées dans le centre de masse et l'angle d'émission  $\theta$  du  $\pi$  par rapport à la direction de la  $\Delta$  dans le laboratoire tirée dans la distribution de probabilité  $P(\theta) \propto 1 + 3h\cos^2\theta$  (la  $\Delta$  étant assimilé à une onde P).  $h$  est l'hélicité de la  $\Delta$ , tirée de manière aléatoire lors la création de cette dernière (Boudard et Cugnon 2008).

### Réflexion/Transmission

Le temps pour qu'une particule atteigne le bord du puits de potentiel est aussi calculé. Lorsque cet avatar est considéré, il faut décider si la particule est réfléchié ou transmise. Si son énergie cinétique n'est pas supérieure à son énergie potentielle, elle est réfléchié, sinon elle est transmise avec une probabilité de transmission. Cette probabilité est prise égale à la probabilité de transmission d'une onde plane sur une marche de potentiel multipliée par la probabilité de passage d'une barrière coulombienne, si la particule est chargée. Cette barrière est calculée à un rayon égal au rayon moyen du noyau (hors diffusivité) augmenté d'un rayon donné à la particule.

Si la particule est transmise, elle a pour énergie son énergie cinétique à laquelle on soustrait le potentiel qu'elle ressentait dans le noyau. Dans la version 4.2 elle garde sa direction, alors que dans la 4.5 elle subit une déflexion coulombienne. La réfraction n'est actuellement pas prise en compte. Une étude avait été faite sur le sujet, mais n'avait pas donné de résultat probant. Depuis, INCL4 a évolué, et cette étude pourrait être reprise si des besoins se faisaient sentir.

### 1.3.5 Blocage de Pauli

Lorsqu'un avatar est considéré il faut vérifier que ces produits peuvent effectivement être créés et notamment s'assurer qu'il ne sont pas bloquer par le principe de Pauli. Dans INCL4 le blocage de Pauli opère dans l'espace de phase. On teste la présence de particules dans une cellule d'extension  $r_{PB} = 3.18 fm$  en espace

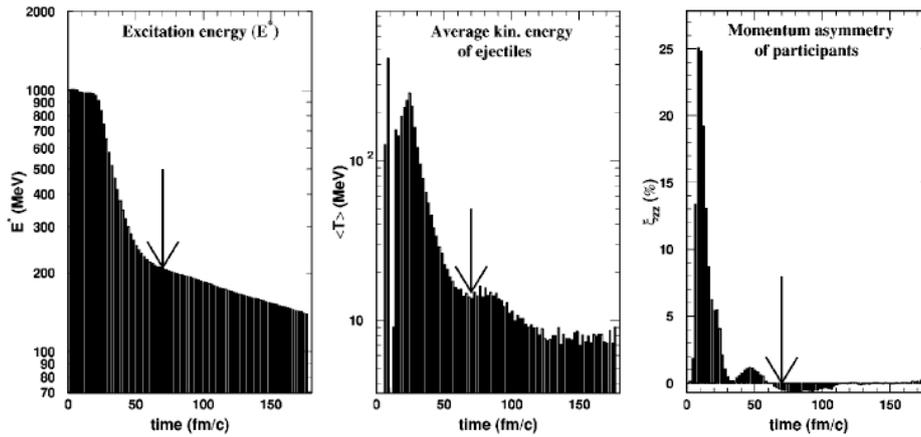


FIGURE 1.5 – Evolution en fonction du temps de trois observables de la cascade intranucléaire. A gauche l'énergie d'excitation du noyau, au milieu l'énergie cinétique moyenne de la particule émise et à droite l'asymétrie de moment des participants. Ces figures sont tirées de (Boudard et al. 2002).

et  $p_{PB} = 200 \text{ MeV}/c$  en moment. Ces paramètres sont un compromis et ont été ajustés afin d'avoir un comportement stable pour des variations modérés, sorte de minimum local, et ils conduisent à un volume de 2,38 unités d'espace de phase. Cette méthode est appelé Pauli statistique local.

Un autre test, appelé principe de Pauli dynamique cohérent (CDPP pour *Coherent Dynamical Pauli Principle*), est appliqué pour éviter les éventuels écueils résultant de la possible création de trous dans la mer de Fermi lors de l'initialisation. En effet, si des trous existent, la méthode de Pauli statistique local peut permettre la réalisation d'avatars qui conduiront à une énergie d'excitation négative. Ce CDPP corrige alors ce défaut. Cependant, dans INCL4.5, pour la première collision, c'est la méthode du Pauli strict qui est utilisé, i.e. des impulsions en sortie supérieures au moment de Fermi (Henrotte 2005).

### 1.3.6 Fin de la cascade

La cascade est un processus durant lequel des particules énergétiques sont émises et au bout duquel le noyau est laissé dans un état excité et ayant perdu la mémoire de sa formation. C'est sur la base de ces caractéristiques-mêmes que le temps de fin de cascade est défini dans INCL. Ainsi la figure 1.5, tirées de la référence (Boudard et al. 2002) où la détermination précise de ce temps a été faite, illustre bien cette notion de temps de fin du processus de cascade. Une étude de la sensibilité liée à ce temps a permis d'aboutir à la formule suivante

$$t_{fin} = 70 \text{ fm}/c \left( \frac{A_T}{208} \right)^{0.16}, \quad (1.29)$$

où  $A_T$  est la masse ou nombre de nucléons du noyau cible. Le paramètre d'impact, comme l'énergie du projectile, n'entre pas en ligne de compte du fait notamment du caractère diffus de la surface du noyau.

Dans INCL4.5, de manière à gagner du temps de calcul, la cascade est aussi stoppée si aucun des  $\pi$  et des nucléons dans le noyau n'a une énergie cinétique supérieure à  $T_F + 10 \text{ MeV}$ . Ce critère laissant les résultats physiques inchangés. Il est à noter que la cascade est évidemment arrêtée dès que le projectile ressort avec

son énergie cinétique inchangée sans avoir occasionner la moindre collision. C'est le cas des réactions dites *transparentes*.

### 1.3.7 Autres améliorations dans INCL4.5

Parmi toutes les étapes et caractéristiques utiles et nécessaires au bon déroulement d'un calcul de cascade intranucléaire avec INCL, j'ai mentionné de temps à autres des changements dans INCL4.5 par rapport à INCL4.2. On peut rappeler les potentiels des nucléons devenus dépendants de l'isospin et de l'énergie, les potentiels des pions, qui n'existaient pas dans INCL4.2, le Pauli strict sur la première collision ou encore l'ajout d'un critère d'arrêt de la cascade ( $E_{cinétique} > T_F + 10MeV$ ) pour gagner du temps de calcul tout en préservant la qualité des résultats.

Il y a deux autres améliorations dans INCL4.5 par rapport à INCL4.2 qui sont importantes : la production de particules composites, noyaux légers de masse  $A$  inférieure à 8, et le degré de validité des résultats aux basses énergies (sous la centaine de MeV).

#### Emission de particules composites ou noyaux légers

INCL considère le noyau comme un ensemble de nucléons avec éventuellement formation de  $\Delta$  et  $\pi$ , mais nullement présence d'agrégat de nucléons, puisque les nucléons sont supposés indépendants.

L'idée retenue pour pouvoir émettre des particules composites ou noyaux légers a été de considérer que ceux-ci se formaient par agrégation de nucléons autour d'un nucléon sortant. Il a fallu alors définir un espace de phase,  $h$ , plausible, ainsi que la position radiale,  $R$ , où ces assemblages pouvaient se réaliser. Les valeurs obtenues par ajustement sur des données expérimentales sont  $h = 387MeV \cdot fm/c$  et  $R = R_0 + 2fm$ <sup>13</sup>. Cette valeur de  $R$  prend en compte le fait que cela se produit en périphérie, mais dans une région où la densité de nucléon n'est pas négligeable.

Bien sûr plusieurs noyaux de masses différentes peuvent être candidats. Le critère de sélection est basé sur une énergie d'excitation minimale du noyau sortant. Ensuite ce noyau doit être capable de franchir la barrière coulombienne, sinon seul le nucléon de départ est admis à sortir.

La limite habituellement prise pour la masse du noyau émis est  $A=8$ , afin de rester dans des temps de calcul raisonnables. Cependant, pour des études spécifiques, des masses plus lourdes peuvent être prises en compte.

#### Extension aux basses énergies

Étonnement INCL4.2 a donné des résultats assez raisonnables pour des spectres de neutrons et protons avec des projectiles d'énergies descendants jusqu'à 50 MeV (Cugnon et Henrotte 2003). Une explication (Yariv et al. 2008), déjà mentionnée dans la section 1.2.1 (page 16), a permis en partie de comprendre cet état de fait. Cependant des améliorations pouvaient être apportées, notamment au niveau de la section efficace de réaction qui restait sous-estimée.

Pour pallier ce défaut dans INCL4.5 trois points ont été traités :

1. suppression du critère *cutNN* pour la première collision (mentionnée page 29),

<sup>13</sup>. Dans INCL4.6 des valeurs différentes sont données à  $h$  suivant la masse du noyau composite et la valeur de  $R$  a été réajustée :  $R = R_0 + 1fm$

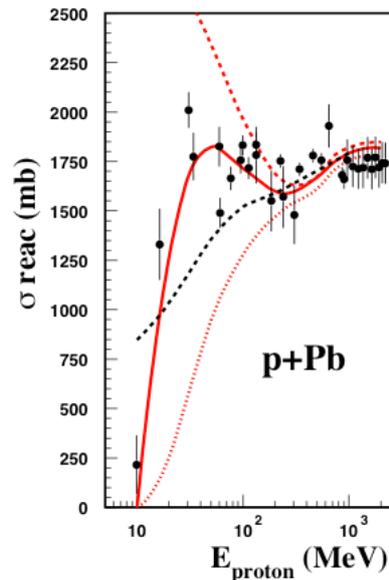


FIGURE 1.6 – Illustration de différents effets sur la section efficace de réaction en fonction de l'énergie du projectile. La réaction étudiée est  $p+Pb$  et les données expérimentales sont tirées de (Barashenkov 1993, Prael et Chadwick 1997, Carlson 1996). La courbe noire en tirets représente INCL4.2. Les courbes rouges sont issues de INCL4.5, sachant que la courbe en tirets ne prend pas en compte la déflexion coulombienne, celle en pointillés ne prend pas en compte le critère de Local Energy et la courbe en trait plein est la version complète de INCL4.5.

2. déflexion coulombienne en entrée, et
3. correction de l'énergie de la particule suivant sa position lors d'un avatar (*Local Energy*).

Point 1 - Ce paramètre et critère *cutNN* n'est utile que pour éviter de perdre inutilement du temps de calcul. Cependant, dans le cas de la première collision, il doit être supprimé, sinon une partie de la section efficace ne sera pris en compte (en lien avec le point 3).

Point 2 - La déflexion coulombienne est d'autant plus forte que l'énergie du projectile est faible. Aussi elle doit être prise en compte pour l'extension aux basses énergies pour éviter de surestimer la section efficace de réaction.

Point 3 - Une des idées de base de INCL est la vitesse constante des particules dans le noyau. De manière à concilier, d'une part, cette idée fondamentale permettant le suivi simple et permanent de toutes les particules avec, d'autre part, la réalisation des interactions aux bonnes énergies quelque soit le lieu, il a été décidé de corriger l'énergie cinétique de la particule du potentiel ressenti. Ainsi une particule interagissant près de la surface verra son énergie cinétique réduite et sa section efficace de réaction augmentée. Le point 1 est alors nécessaire, sinon la méthode de *Local Energy* serait inhibée.

La figure 1.6 permet de visualiser les effets des différents points (le 1 et le 3 étant liés), ainsi que de comparer les versions 4.2 et 4.5.

## 1.4 LE MODÈLE DE DÉSEXCITATION DE GSI : ABLA

Le code Abla décrit la seconde phase de la spallation, c'est à dire la désexcitation du noyau issu de la cascade intranucléaire. Les bases d'Abla telles qu'on le

connaît aujourd'hui ont été décrites dans l'article de J. J. Gaimard et K.-H. Schmidt (Gaimard et Schmidt 1991). Comme je l'ai fait pour INCL, je décrirai ici les versions qui pour l'une, appelée Ablar par la suite, a été implanté dans les codes de transport de particules LAHET3.16 (Prael 2001) et MCNPX2.5.0 (Hendricks et al. 2005), et pour l'autre, contenant des améliorations et ajouts, et appelée Ablar07, a été utilisée lors du *Benchmark of spallation models* de 2010 (chapitre 2, section 2.2, page 57). Trois publications synthétisent l'information sur ces deux versions d'Ablar. Pour la partie évaporation de la version Ablar l'article de Junghans (Junghans et al. 1998), pour la partie fission l'article de J. Benlliure (Benlliure et al. 1998), et pour les nouveautés dans la version Ablar07 l'article de Kelic et al. (2008) dans le compte rendu de la réunion d'experts donnant le point départ de ce qui sera le *Benchmark of spallation models*. Dans la suite d'autres articles sont cités sur des points bien précis.

Dans la version Ablar les voies étaient l'évaporation de nucléons et d' $\alpha$ , ainsi que la fission. Ablar07, lui, incorpore l'évaporation de nucléons et de tout type de noyau (principalement du deuton à l' $\alpha$ , mais aussi des noyaux de masse intermédiaire (IMF pour *Intermediate Mass Fragment*)), ainsi que de  $\gamma$ , et ajoute une possible phase de multifragmentation dès la sortie de la cascade intranucléaire. Exceptée la voie de multifragmentation, toutes les voies de désexcitations sont en compétition. La figure 1.7 schématise les différents processus existants dans Ablar07.

Je donne ci-dessous le formalisme général et les principaux ingrédients pour chaque voie de désexcitation.

### 1.4.1 Évaporation

De façon à mettre en compétition les différentes voies d'évaporation, ainsi que celle de fission, il faut calculer les probabilités relatives de chacune, ce qui revient à calculer les largeurs associées aux processus. Si dans la version Ablar seuls les nucléons et l' $\alpha$  étaient pris en compte, Ablar07 a ouvert l'évaporation à tout type de noyau ( $Z \leq 2$  et  $Z \geq 3$ ), ainsi qu'au  $\gamma$ . Si l'expression de la largeur pour les  $\gamma$  est différente de celles des noyaux, la mise en oeuvre de l'évaporation des noyaux de  $Z \geq 3$  est aussi légèrement différentes de celle des  $Z \leq 2$  pour des raisons, non de physique, mais de temps de calcul.

#### Évaporation ( $Z \leq 2$ )

Ablar et Ablar 07 repose sur le formalisme de Weisskopf-Ewing, éq. 1.13 (page 21), où le moment angulaire n'est pas pris en compte. Cependant dans Ablar07 le moment angulaire du noyau est toujours corrigé après chaque émission de manière à avoir la valeur la plus juste dans le cas de la fission où ce moment joue. Les deux ingrédients importants de l'évaporation, mentionnés dans la section 1.2.2, sont le paramètre de densité de niveaux et la section efficace de capture, appelée aussi section efficace inverse.

On retrouve dans Ablar07 les mêmes ingrédients que dans Ablar pour le paramètre de densité de niveau. Ainsi, l'expression pour la densité d'état est

$$\rho(E) = \frac{\sqrt{\pi}}{12} \frac{e^S}{a^{1/4} E^{5/4}}, \quad (1.30)$$

avec  $S = 2 \sqrt{a (E + \delta U.k(E) + \delta P.h(E))}$ , l'entropie. L'expression utilisée dans Ablar, contrairement à l'éq. 1.13, prend donc en compte la dépendance du para-



mètre de densité de niveau  $a$  avec l'énergie d'excitation, d'où l'expression de l'entropie.

Dans les faits Abla (Abla07) corrige l'énergie et donne à  $a$  une valeur qui ne prend en compte que les effets de volume et de surface

$$a = 0.073A + 0.095B_S A^{2/3},$$

avec  $B_S$  un facteur pouvant prendre en compte la déformation du noyau.

Le facteur  $\delta U$  prend en compte les corrections de couche (tabulée d'après (Moller et al. 1995)) et  $k(E)$  représente l'atténuation de ces effets avec l'énergie d'excitation :

$$k(E) = 1 - e^{(-\gamma E)},$$

avec  $1/\gamma = \frac{0.4A^{4/3}}{a}$ . Les paramètres ont été ajustés pour retrouver les résultats de calculs microscopiques de noyaux lourds (ceux notamment de la référence (Schmidt et al. 1982), citée dans le tableau 1.1, page 21).

Le facteur  $\delta P$  prend en compte les effets de pair

$$\delta P = -\frac{1}{4}\Delta^2 g + 2\Delta,$$

avec  $\Delta = 12/\sqrt{A}$  l'écart d'appariement moyen et  $g = 6a/\pi^2$  la densité de niveau de particule indépendante au niveau de Fermi. L'atténuation de ces effets est prise en compte par la fonction

$$h(E) = \begin{cases} 1 - \left(1 - \frac{E^*}{E_{crit}}\right)^2 & \text{pour } E < E_{crit}, \\ 1 & \text{pour } E \geq E_{crit} \end{cases},$$

qui n'est donc effective qu'en dessous une énergie critique prise égale à 10 MeV ( $E_{crit}$ )

L'énergie  $E$  utilisée ci-dessus dans les formules est l'énergie d'excitation  $E^*$  corrigée des effets de pair

$$\begin{aligned} E &= E^* & \text{impair}(Z) - \text{impair}(N) \\ E &= E^* - \Delta & \text{impair}(A) \\ E &= E^* - 2\Delta & \text{pair}(Z) - \text{pair}(N) \end{aligned}$$

Cette densité d'état  $\rho$  (éq. 1.30) doit aussi tenir compte des effets collectifs qui accroissent sa valeur. Si le noyau est sphérique l'accroissement viendra d'excitations vibrationnelles et s'il est déformé de bandes rotationnelles (Junghans et al. 1998). Le paramètre définissant le domaine de forme du noyau dans Abla (Abla07) est la valeur absolue de la déformation quadripolaire  $\beta_2$ . Si elle est supérieure à 0.15 le noyau est considéré déformé et l'on prend en compte les bandes rotationnelles, sinon c'est un noyau sphérique et ce sont les excitations vibrationnelles qui entre en jeu. Dans les deux cas ces effets sont atténués en fonction de l'énergie  $E$  définie juste précédemment.

Pour les cas de très basses énergies d'excitation, autour des énergies de séparation, Abla07 a introduit une nouvelle formulation tirée de (Ignatyuk 2001) pour la densité d'états basée sur le concept de densité d'états à température constante. À ces énergies Gilbert et Cameron (Gilbert et Cameron 1965) avaient supposé la température comme ne dépendant pas de l'énergie (contrairement au modèle du gaz de Fermi :  $T = \sqrt{E/a}$ ) et les résultats étaient meilleurs.

Une des améliorations importantes de Abla07 par rapport à Abla est la formulation de la section efficace de capture. Dans la version Abla la section efficace n'est rien d'autre que la section efficace géométrique, alors qu'un soin particulier a été apporté dans Abla07 à l'expression utilisée pour prendre notamment en compte une barrière coulombienne réaliste. Ainsi dans Abla07 la section de capture vaut

$$\sigma_c = \pi R^2 \left(1 - \frac{B}{\varepsilon}\right),$$

où  $R$  est la somme du rayon classique ( $R_{geom}$ ) du système noyau-particule,  $R_{geom} = 1.16 (A_{noyau}^{1/3} + A_{particule}^{1/3})$ , et d'une partie dépendante de l'énergie de la particule,  $R_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2\mu E_{cm}}}$ , avec  $E_{cm} = \varepsilon(A_{noyau} - A_{particule})/A_{noyau}$  et  $\mu$  la masse réduite du système. Ce  $R_\lambda$  ne jouant que dans le cas des basses énergies où la longueur de la particule devient importante.

La barrière coulombienne, dont la forme dans la version Abla était ajustée et calquée sur le potentiel coulombien, est déterminée dans Abla07 par la recherche du maximum du potentiel nucléaire à moment angulaire nul, soit la somme du potentiel nucléaire  $V_N$  et du potentiel coulombien  $V_C$ . L'expression pour le potentiel nucléaire est celle de Bass (Bass 1979)

$$-V_N(s) = \frac{C_1 \cdot C_2}{C_1 + C_2} \cdot \frac{1}{A \cdot e^{(s/d_1)} + B \cdot e^{(s/d_2)}},$$

Les paramètres  $A$ ,  $B$ ,  $d_1$  et  $d_2$  sont ajustés et valent respectivement  $0,333 MeV^{-1} \cdot fm$ ,  $0,007 MeV^{-1} \cdot fm$ ,  $3,5 fm$  et  $0,65 fm$ . Les  $C_i$  représentent les rayons à mi-densité du noyau fils et de la particule émise

$$C_i = R_i \left(1 - \frac{0,9984^2}{R_i^2}\right),$$

avec  $R_i = \left(1,28 \cdot A_i^{1/3} - 0,76 + \frac{0,8}{A_i^{1/3}} + d\right)$  et où  $d$  vaut  $0 fm$  pour le noyau fils et respectivement pour les proton/deuton/triton/ ${}^3He/\alpha$ ,  $3/0/0/0/1 fm$ . Enfin la variable  $s$  est la distance de séparation des surfaces.

Pour le potentiel coulombien l'expression est classique

$$V_C = \begin{cases} 1,44 \frac{Z_1 \cdot Z_2}{r} & \text{pour } r > R_C, \\ 1,44 \frac{Z_1 \cdot Z_2}{2 \cdot R_C} \left(3 - \frac{r^2}{R_C^2}\right) & \text{pour } r \leq R_C \end{cases},$$

avec  $R_C = 1,3 (A_{noyau}^{1/3} + A_{particule}^{1/3})$

Il faut rappeler à ce stade que les probabilités relatives de chaque voie d'émission sont basées sur les largeurs d'émission intégrées sur tout le spectre d'énergie possible de la particule. Or les intégrations numériques sont très consommatrices de temps et les formules analytiques sont préférées. Aussi pour Abla07 et la nouvelle expression de la section efficace de capture, des approximations ont été faites pour permettre une formulation analytique (voir annexe B de (Kelic et al. 2008)) et le résultat final donne une largeur *analytique* moins de 10% supérieure à la largeur *numérique* pour les particules chargées. Aucune différence pour le neutron. S'il est bon de garder cela en mémoire, ces quelques unités de pourcent pouvant favoriser l'émission d'une particule sur une autre ne jouent vraisemblablement pas un grand rôle dans l'analyse des résultats (spectres des particules et noyaux résiduels).

Deux autres effets enfin sont pris en compte dans Abl07 : l'accroissement de volume du noyau chauffé et l'effet tunnel. Pour l'accroissement de volume la conséquence première est l'augmentation du rayon du noyau, et par conséquent la diminution de la barrière coulombienne. L'effet tunnel peut être pris en compte en utilisant des facteurs de pénétration qui ont été déterminés notamment par Avishai (Avishai 1978). Cependant ces nouveaux facteurs multiplicatifs de la section efficace sont aussi dépendants de l'énergie de la particule émise et le problème de l'intégration se re-pose. Pour ce cas, les développeurs d'Abl07 ont tiré une fonction  $f_{tunnel}$  dépendant de plusieurs paramètres dont les masses du noyau fils et de la particule émise, de la température, de la courbure du potentiel, entre autres, obtenue par comparaison des largeurs calculées sans effet tunnel et avec (calcul numérique de l'intégration). Le but étant par la suite d'appliquer l'effet tunnel a posteriori par  $\Gamma_{avec} = \Gamma_{sans} \cdot f_{tunnel}$ .

Une fois la décision prise d'émettre une particule donnée, il faut lui affecter une énergie. Sa direction d'émission est considérée isotropique dans le centre de masse du système émetteur. L'énergie pourrait être tirée aléatoirement dans les distributions données par les largeurs d'émission, mais comme il a été dit plus haut, pour des raisons pratiques et de temps, les expressions des largeurs d'émission ne sont pas utilisées telles qu'elles. Aussi, et parce que cela correspond bien aux résultats physiques, les spectres des particules sont tirées dans des distributions maxwelliennes.

### Évaporation ( $Z \geq 3$ )

Une des lacunes de la version Abl est l'incapacité à reproduire les noyaux dits de masse intermédiaire ( $3 \leq A \leq 20$ ). Dans Abl07 deux mécanismes ont été implantés qui permettent la production de ce type de noyaux, la multifragmentation qui sera évoquée page 42 et l'évaporation.

Si dans certains codes, comme GEMINI et GEMINI++ (Charity 2008) par exemple, ces noyaux sont des produits de fission asymétriques (voir la cassure binaire, page 24), dans Abl07 suivant la valeur du paramètre  $Z^2/A$  (cf. page 23) le noyau excité sera testé dans la voie fission ou dans la voie évaporation de noyaux de masse intermédiaire. Ceci est basé sur le point de Businaro-Gallone<sup>14</sup> (Businaro et Gallone 1957) et la valeur adoptée dans Abl07 pour  $Z^2/A$  est 22. Pour un noyau donné, en dessous de cette valeur le test sur l'évaporation d'IMF (appelée fragmentation dans la figure 1.7) est préféré à la fission.

S'il fallait calculer les largeurs d'émission de toutes les configurations possibles concernant l'évaporation d'IMF, le temps de calcul deviendrait prohibitif, aussi une stratégie différente de l'émission de particules est adoptée. D'abord est calculée la valeur de la largeur d'émission d'IMF incluant toutes les configurations possibles ( $\Gamma_{tot}^{IMF}$ ), ensuite, si cette voie d'émission a gagné la compétition vis-à-vis des autres voies, les largeurs de chaque configuration sont calculées en utilisant là encore des approximations pour limiter le temps de calcul.

La largeur  $\Gamma_{tot}^{IMF}$  est obtenue facilement en prenant en compte le fait expérimental qui montre que la distribution en charge des IMF suit une loi de puissance. Ainsi pour un IMF de charge  $Z$ , la largeur est

$$\Gamma^{IMF}(Z) = a \cdot Z^b. \quad (1.31)$$

14. On retrouve en fait le même concept dans la cassure binaire (page 24 et (Moretto et al. 1984))

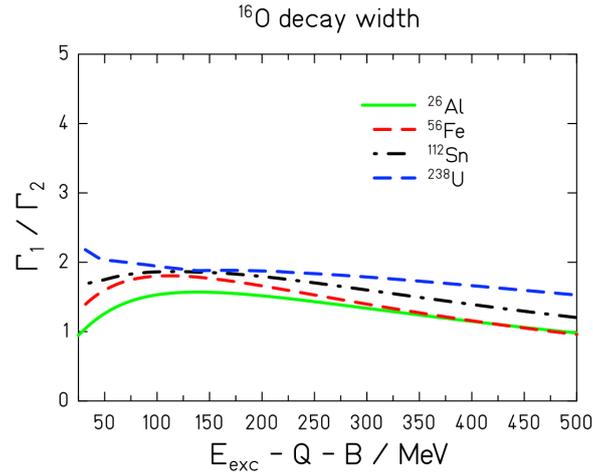


FIGURE 1.8 – Comparaison des largeurs de production de l' $^{16}\text{O}$ , à partir de quatre noyaux émetteurs, obtenues par la méthode prenant en compte les densités d'état des deux noyaux ( $^{16}\text{O}$  et son partenaire),  $\Gamma_2$ , et la méthode utilisant l'approximation d'un seul système,  $\Gamma_1$ . Figure tirée de (Kelic et al. 2008).

Une fois  $a$  et  $b$  déterminés, il suffit d'intégrer de la plus petite charge ( $Z=3$ ) à la plus grande (celle du noyau chaud) pour obtenir

$$\Gamma_{tot}^{IMF} = \int_3^{Z_{max}} a \cdot Z^b = a(Z_{max}^{b+1} - 3^{b+1}) \quad (1.32)$$

Pour la détermination des largeurs individuelles il faudrait utiliser la même formulation que celle utilisée pour l'émission de particule, éq. 1.12 page 20, mais en remplaçant le simple espace de phase de la particule par la densité d'état du noyau émis, de plus dépendante de son énergie d'excitation. La complexité est d'un autre ordre, notamment du fait d'une double intégration. La solution adoptée dans Abla07 est de considérer un seul système pour l'IMF et son partenaire, en prenant en compte la déformation, le moment angulaire et l'énergie d'excitation donnés par la configuration des deux noyaux se touchant. Cette approximation, détaillée dans (Kelic et al. 2008), a été comparée à la formulation complète et a été jugée correcte d'après la figure 1.8.

Enfin l'énergie cinétique des deux fragments est tirée de la répulsion coulombienne et les énergies d'excitation distribuées dans le rapport des masses de chacun.

### Évaporation $\gamma$

À haute énergie d'excitation la voie de désexcitation par émission de  $\gamma$  est négligeable comparée à l'émission de particule, mais lorsque l'on se rapproche, dans les dernières étapes, de l'énergie de séparation du neutron (les barrières coulombiennes éliminant les particules chargées), alors l'émission de  $\gamma$  peut rivaliser. Cette émission se passe principalement par la résonance géante dipolaire dont l'expression est connue, mais une fois encore des arguments physiques permettent d'en simplifier la formulation. Ainsi utilisant le fait que la compétition ne joue qu'autour de l'énergie de séparation du neutron, que le modèle de la température constante s'applique (voir page 36) et que pour l'intensité radiative une expression simple peut être utilisée, alors la largeur d'émission de  $\gamma$  s'écrit

$$\Gamma_{\gamma}(S_n) = 0,624 \cdot 10^{-9} \cdot A^{1,6} \cdot T^5 \quad (1.33)$$

### 1.4.2 Fission

Le traitement de la fission se passe par deux phases bien distinctes, comme pour l'évaporation, c'est à dire le calcul de la largeur de fission entrant en compétition avec les autres voies (hors multifragmentation traitée ci-après, section 1.4.3), puis, si la fission est choisie, la détermination des caractéristiques des deux fragments et notamment leurs charges et masses.

Comme il a été décrit dans la section 1.2.2 page 24, la largeur de fission a la forme suivante,

$$\Gamma_f(t) = \Gamma_{BW} \cdot K \cdot f_\beta(t),$$

où  $\Gamma_{BW}$  est la largeur de fission de Bohr-Wheeler,  $K$  le facteur de Kramers et  $f_\beta(t)$  la fonction rendant compte des effets dynamiques de la dissipation,  $\beta$  étant le coefficient réduit de dispersion.

La différence principale entre Abla et Abla07 est l'expression utilisée pour cette fonction  $f_\beta(t)$ . Dans Abla c'est une simple fonction échelon qui ainsi n'ouvre la compétition pour la fission qu'après un temps donné. Ce temps est le temps de transition, défini comme temps à partir duquel la largeur a atteint 90% de sa valeur asymptotique ( $\Gamma_{BW} \cdot K$ ). Dans Abla07 l'étude de cette fonction est tirée de la résolution de l'équation de Fokker-Planck dynamique (Jurado et al. 2005).

En deux mots, la fission est un processus collectif qui ne peut avoir lieu que s'il y a transition du mouvement individuel des nucléons vers un mouvement collectif, donc que l'énergie d'excitation individuelle devienne énergie d'excitation collective. Ce passage est entre autre caractérisé par le coefficient réduit de dispersion  $\beta$ . Pour connaître dynamiquement l'évolution de cette transition il faut étudier l'évolution du ou des degrés de liberté collectifs (ex. : distance entre les deux fragments naissants), ce qui peut se faire en résolvant l'équation de Fokker-Planck. Ainsi la largeur de fission sera dépendante du temps via des distributions de probabilité de transition solution de l'équation de Fokker-Planck. B. Jurado (Jurado et al. 2005) explique que, une fois encore, pour obtenir un résultat correct dans un temps raisonnable, il a fallu avoir recours à une approximation analytique de cette équation. Ainsi la fonction  $f_\beta(t)$  se trouve être le rapport des distributions de probabilités ( $W$ ), au point selle ( $x_b$ ), calculées au temps  $t$  et à l'équilibre ( $t \rightarrow \infty$ ).

$$f_\beta(t) = \frac{W(x = x_b; t; \beta)}{W(x = x_b; t \rightarrow \infty; \beta)},$$

Au final, prenant une forme parabolique pour le potentiel nucléaire, cette distribution  $W$  aura une forme gaussienne de largeur  $\sigma$  et la largeur de fission s'écrira

$$\Gamma_f(t) = \Gamma_{BW} \cdot K \cdot \frac{kT}{\mu\omega_1^2 \cdot \sigma^2} \cdot \frac{e^{-\frac{(x_b - x_{mean})^2}{2\sigma^2}}}{e^{-\frac{\mu\omega_1^2 \cdot x_b^2}{2kT}}},$$

avec

$$\sigma^2 = \frac{kT}{\mu\omega_1^2} \left\{ 1 - e^{(-\beta(t+t_0))} \cdot \left[ \frac{2\beta^2}{\beta_1^2} \sinh^2 \left( \frac{1}{2} \beta_1 (t + t_0) \right) + \frac{\beta}{\beta_1} \sinh(\beta_1 (t + t_0)) + 1 \right] \right\}$$

Les paramètres que l'on trouve dans l'expression de la largeur sont

- la température  $T$  du noyau fissionnant,

- la constante de boltzman  $k$ , la masse réduite associée au degré de liberté de déformation  $\mu$  et la courbure du potentiel  $\omega_1$  qui forment le facteur de rigidité  $\frac{\mu\omega_1^2}{k}$ , fonction dans Abla07 de la masse  $A$  du noyau et de sa fissilité,
- évidemment la dissipation  $\beta$ ,
- dont sa valeur critique définissant la frontière entre les cas sur- et sous-amortis est  $\beta_1 = \sqrt{\beta^2 - 4\omega_1^2}$ ,
- $t_0$ , qui représente le temps nécessaire pour atteindre le point initial du mouvement où  $\sigma \neq 0$  et dont l'expression dépend de la valeur de  $\beta_1$ ,
- et enfin  $x_{mean}$  qui prend en compte le fait que le noyau n'est pas forcément sphérique dans les conditions initiales, et là encore son expression dépend de la valeur de  $\beta_1$ .

Bien entendu on a aussi la barrière de fission, évoquée dans la section 1.2.2 (page 23), qui varie en fonction du moment angulaire, et le paramètre de densité de niveau du noyau.

En ce qui concerne les caractéristiques des fragments émis l'approche est semi-empirique et le papier de référence celui de J. Benlliure (Benlliure et al. 1998). La notion de semi-empirisme vient du fait que l'approche combine des parties macroscopiques et des parties microscopiques. Je donne ci-dessous les grandes lignes. Le rendement d'un fragment de fission donné, caractérisons-le par son nombre de neutrons, est le rapport de son nombre d'états de transition au dessus de son potentiel à la barrière de fission à la somme de ces mêmes nombres pour tous les fragments possibles. Ce qui s'écrit

$$Y(E, N) = \frac{\int_0^{E-V(N)} \rho_N(U) dU}{\sum_{N=0}^{N_{\text{fis}}} \int_0^{E-V(N)} \rho_N(U) dU},$$

où  $\rho$  est la densité d'état,  $E$  l'énergie d'excitation,  $V(N)$  l'énergie potentielle à la barrière de fission et  $N_{\text{fis}}$  le nombre de neutrons du noyau fissionnant. Il se trouve que ce rendement peut aussi s'écrire de manière approchée

$$Y(E, N) \sim e^{2\sqrt{aE^*}},$$

avec  $a$  le paramètre de densité de niveau pris simplement égal à  $A/8$  dans ce cas et  $E^* = E - V(N)$  l'énergie disponible au dessus du potentiel. Par conséquent la distribution des fragments de fission tient à la détermination de ce potentiel  $V(N)$ . L'expression utilisée est la suivante

$$V(N) = C_{\text{sym}}(N_{\text{fis}}/2 - N)^2 + \delta U_i + C_{\text{asym}(i)}(N_i - N)^2 \quad (1.34)$$

et un exemple est donné pour l' $^{238}\text{U}$  sur la figure 1.9 pour visualiser les différentes contributions.

La partie macroscopique du potentiel est représentée par la parabole symétrique avec le paramètre  $C_{\text{sym}}$  et la partie microscopique par les effets de couche caractérisés par les deux positions  $N_i$  ( $i = 1, 2$ ), les forces respectives  $\delta U_i$  et les deux courbures  $C_{\text{asym}(i)}$ . Ces paramètres sont ajustés sur des données expérimentales. Les rendements ont au final des formes de gaussiennes (partie symétrique et parties asymétriques) et un tirage aléatoire permet de déterminer le  $N$  du fragment. Les autres caractéristiques (charge, énergie d'excitation) sont obtenues notamment

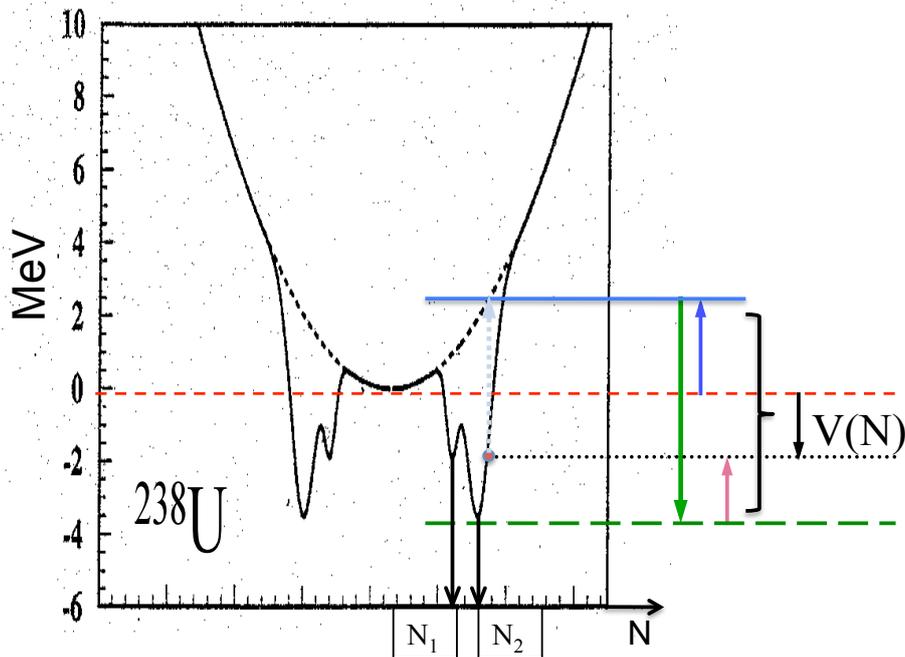


FIGURE 1.9 – Energie potentielle à la barrière de fission pour l' $^{238}\text{U}$  en fonction de l'asymétrie de masse exprimée par le nombre de neutrons de l'un des fragments préformés. Figure de base tirée de (Benlliure et al. 1998). Les couleurs des flèches correspondent à celles des contributions de l'éq. 1.34

par des considération de conservation, comme le rapport des nombres de neutrons et de protons dans le noyau fissionnant, mais peuvent prendre en compte des effets vus expérimentalement comme la polarisation de charge dans le cas de la fission asymétrique. De façon à reproduire au mieux la réalité des faits, les caractéristiques sont définis au moment le plus approprié. Ainsi l'asymétrie de masse est définie au point selle, sa variation étant trop faible sur le temps séparant point selle et point de scission, alors que le rapport  $N/Z$  est lui défini au point de scission, puisqu'il peut encore varier après le point selle.

Dans le cas de la fission spontanée, la méthode est différente. On ne considère pas l'espace de phase, mais la variation en fonction de l'asymétrie de masse de l'effet tunnel à travers la barrière.

Enfin, entre le point selle et le point de scission l'évaporation de particule est permise.

### 1.4.3 Multifragmentation

Abla07 considère la possibilité d'une phase de multifragmentation (Schmidt et al. 2002). Cette voie a la particularité de ne pas être en compétition avec les autres processus de désexcitation. Le noyau excité issu de la cascade intranucléaire peut subir une multifragmentation si sa température est supérieure à un seuil. L'utilisateur du code peut soit choisir une valeur fixe pour cette température, soit utiliser une valeur dépendante de la masse du noyau excité (Natowitz et al. 2002) (avec une limite inférieure égale à 5.5 MeV).

Si ne tenir compte que de l'espace de phase pour déterminer les partitions possibles n'est pas suffisant, par manque de dynamique, cette dernière est encore

mal connue. Aussi Abl07 procède de manière pragmatique en deux étapes, en se reposant sur des observations expérimentales.

La première étape consiste en la détermination de la quantité de masse à émettre (donc aussi de l'énergie) pour aboutir à un noyau dont la température sera sous le seuil de la multifragmentation. Cette méthode est basée notamment sur trois points : i) lorsqu'une unité de masse est éjectée le noyau perd de l'énergie, ii) d'après l'expérience (Enqvist et al. 1999) cette énergie varie de 10 MeV pour une énergie d'excitation de 2,9.A MeV à 5 MeV pour une énergie de 11,8.A, et iii) le rapport  $N/Z$  du noyau initial est conservé pendant la multifragmentation, ce qui permet de déterminer la charge à émettre.

La seconde phase définit les masses  $A$ , charges  $Z$  et énergies d'excitation des noyaux émis. Les masses  $A$  sont déterminées à partir d'une loi de puissance de la section efficace de production observée expérimentalement

$$\frac{d\sigma}{dA} \propto A^{-\tau},$$

où le paramètre  $\tau$  est pris dans Abl07 dépendant linéairement de l'énergie d'excitation par nucléon. Les masses  $A$  sont ainsi définies itérativement jusqu'à ce que l'on ait éjecté exactement la masse  $A$  prévue dans la première phase. Les charges  $Z$  associées aux masse  $A$  émises sont tirées dans des gaussiennes telles que la charge moyenne  $Z_{mean}$  respecte le rapport  $A/Z$  du noyau chaud et que la largeur dépend de la température et du terme symétrique de l'équation d'état de la matière nucléaire (d'après des études cherchant à déterminer ce dernier terme grâce à l'étude de la multifragmentation)

$$\sigma_Z^2 = \frac{T}{C_{sym}}.$$

Enfin l'énergie d'excitation des noyaux émis ( $Z > 2$ ) est basée sur la température seuil de multifragmentation et leur paramètre de densité de niveau, et leur énergie cinétique est due à la répulsion coulombienne et à l'agitation thermique. Pour les particules  $Z \leq 2$  l'énergie cinétique est tirée dans une maxwellienne.

## 1.5 UTILISATION DANS UN CODE DE TRANSPORT

Jusqu'ici je n'ai abordé les réactions de spallation sous le seul angle de la physique du mécanisme microscopique. Cette ou ces modélisations du mécanisme des réactions de spallation seront testées avec différents objectifs dans le chapitre 2. La spallation peut aussi être vue sous un autre angle, celui de la simulation macroscopique, ou, en d'autres termes, de l'étude numérique de systèmes complexes mettant en jeu des réactions de spallation par des codes de calcul. Le passage obligé est alors l'implantation des codes reproduisant les réactions de spallation dans un code de transport de particules. C'est le sujet abordé dans cette section.

Comme il a été dit à plusieurs reprises dans les sections précédentes, les codes INCL4 et Abl sont développés avec le double objectif de reproduire au mieux les résultats expérimentaux et de le faire avec des temps de calcul les plus courts possibles. Une des raisons de ce double objectif est la volonté d'utilisation de ces codes pour des projets macroscopiques mettant en jeu des réactions de spallation. Ces projets sont nombreux et divers, et je ne citerai donc que des exemples abordés dans ce mémoire. Il y a les faisceaux d'ions radioactifs avec le projet EURISOL (section 3.2.1, page 103), les sources de neutrons de spallation comme Megapie à

PSI (section 3.2.2, page 111) et ESS, *European Spallation Source*, à Lund (section 3.2.3, page 117), où dans ces premiers cas performances et études de sûreté nécessitent de connaître les flux de particules émises ainsi que les noyaux, très souvent radioactifs, produits, mais il y a aussi des projets teintés plus physique fondamentale, comme l'étude de la cosmogénèse dans les météorites où les réactions de spallation deviennent révélatrice de leur histoire (section 3.1.3, page 99).

Dans tous ces projets, que ce soit la particule projectile ou les particules secondaires émises lors des réactions de spallation, elles doivent être transportées dans le ou les matériaux en question, ce qui est traité par les codes de transports de particules.

Les codes de transports traitant le domaine énergétique des réactions de spallation doivent, pour être complets, traiter le devenir de particules ayant des énergies allant de quelques GeV à quelques meV pour les neutrons. À la fois pour des raisons de connaissances de la physique et pour des questions de moyens pratiques, deux choix s'imposent pour traiter les interactions des particules : les bases de données ou la modélisation. Ainsi le choix de la base de données a été pris pour traiter les interactions des particules de basses énergies et notamment les neutrons, car, d'une part, les *troupe* nombreuses résonances observées dans les sections efficaces ne peuvent être reproduites par les modèles et, d'autre part, la gamme en énergie allant de quelques meV à 20 MeV d'abord, puis récemment 150 MeV pour certains noyaux, permet expérimentalement de déterminer les caractéristiques nécessaires au traitement des interactions, après avoir été complétées par des évaluations (voir par exemple Salvatores et Fort (2001)). Pour ce qui est des énergies supérieures et dans le domaine de la spallation la situation est exactement l'inverse. La gamme en énergie, de la centaine de MeV à quelques GeV, ouvre tant de voies que construire une base de données nourrie par une batterie d'expériences est inimaginable et la connaissance de la physique des réactions de spallation permet une modélisation acceptable des interactions.

On retrouve cette *séparation* ou *différence* (basses et hautes énergies) dans les codes ou systèmes de codes de transport. Ainsi, par exemple, on voit sur la figure 1.10 le système de code CALOR (Fu et Gabriel 1998) incluant entre autres les codes de transport hautes énergies HETC (Armstrong et Chandler 1972, Chandler et Armstrong 1972, Gabriel 1985) et basses énergies MORSE (Straker 1970) et de même sur la figure 1.11 le LAHET Code System (LCS) (Prael 1989) avec LAHET (Los Alamos High Energy Transport) qui était basé sur HETC<sup>15</sup> et a suivi son propre développement, et HMCNP, version modifiée de MCNP (Briesmeister 1986), le pendant de MORSE à Los Alamos.

Pour l'implantation de INCL4.2 et Abla notre choix s'est porté d'abord sur LAHET. Ensuite l'implantation dans le code de transport MCNPX, code intégrant toute les fonctionnalité de LCS, fut facilitée. Récemment les nouvelles versions INCL4.5<sup>16</sup> et Abla07 ont été implantées dans une version  $\beta$  de MCNPX2.7. Je développe ces implantations dans les sections suivantes avec les différentes étapes en mentionnant les difficultés rencontrées et les résultats obtenus. Je dirai aussi pour finir quelques mots de l'implantation de ces codes dans d'autres codes de transport, comme PHITS et GEANT4.

15. ...lui-même extension du code NMTC (W. A. Coleman and T. W. Armstrong, Nucl. Sci. Eng, 43, 353 (1971))

16. et enfin INCL4.6

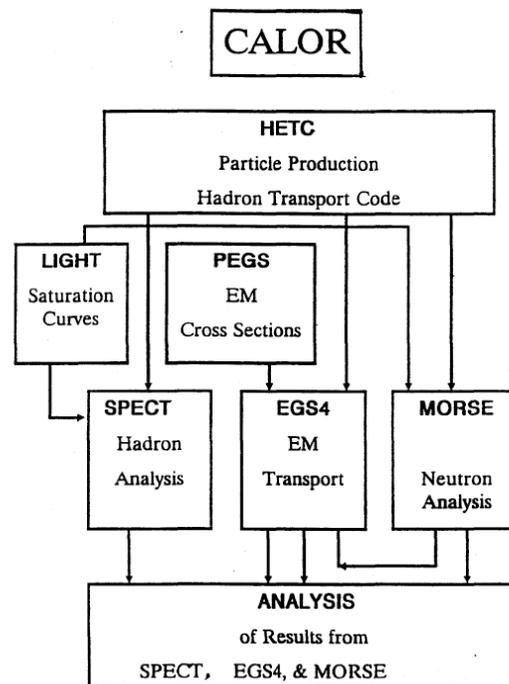


FIGURE 1.10 – Système de codes CALOR (Fu et Gabriel 1998) développé à Oak Ridge pour aider les expérimentateurs à la conception de calorimètres, d'où son nom. Il comprend notamment le code HETC pour la haute énergie et le code MORSE pour la basse énergie. Figure tirée de (Fu et Gabriel 1998)

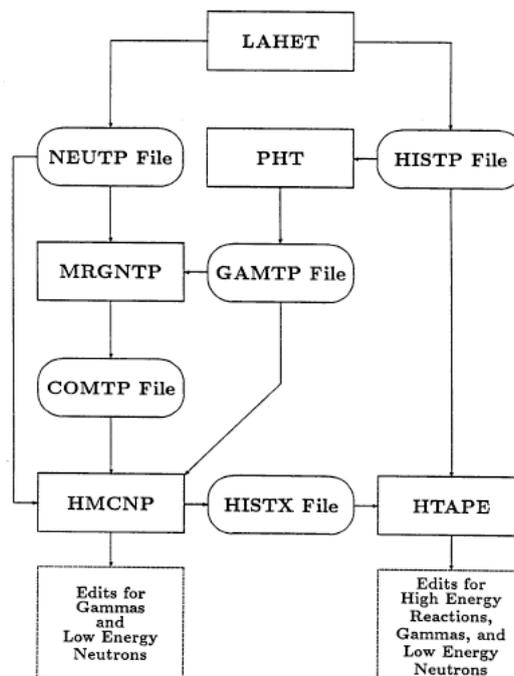


FIGURE 1.11 – Système de codes LCS (LAHET Code System) (Prael 1989) développé à Los Alamos. Il comprend notamment le code LAHET pour la haute énergie et le code HMCNP pour la basse énergie. Figure tirée de (Prael 1989)

### 1.5.1 LAHET3.16 - MCNPX2.5.0

La version de LAHET dans laquelle est implantée INCL4.2 (Boudard et al. 2002) et Abl (Junghans et al. 1998, Benlliure et al. 1998) est la version LAHET3.16 (Prael 2001), qui sera d'ailleurs la dernière version publiée. Comme l'indique la figure 1.11 les deux principaux codes du LCS sont LAHET et HMCNP. Le code HMCNP traite le transport des neutrons de basses énergies, c'est à dire d'énergies inférieures à 20 MeV, et des photons, LAHET, lui, traite les neutrons d'énergies supérieures à 20 MeV ainsi que les particules chargées, du proton à l' $\alpha$ , d'un seuil pris par défaut à 1 MeV par unité de masse à quelques GeV. Les modèles gérant les réactions de spallation dans LAHET3.16 sont Bertini (Bertini 1963; 1969) et Isabel (Yariv et Fraenkel 1979; 1981) pour la partie cascade intranucléaire et Dresner (Dresner 1962) pour la partie évaporation associé au modèle RAL (Atchison 1979) ou ORNL (Barish et al. 1981) pour la fission. Pour être plus juste il faut ajouter qu'un modèle de pré-équilibre (Prael et Bozoian 1988) avait été implanté pour notamment corriger l'énergie d'excitation trop élevée issue de la cascade Bertini. De plus, si des d, t,  $^3\text{He}$  et  $\alpha$  sont produits pendant les réactions de spallation via Dresner seulement, seul le code Isabel était capable de les utiliser comme projectiles dans des réactions secondaires.

L'implantation de INCL4.2 et Abl dans LAHET était intéressante à la fois pour LAHET et ses utilisateurs, et pour nous. INCL4.2 et Abl avaient montré de bonnes qualités pour reproduire nombres de données expérimentales (Boudard et al. 2002), le point fort d'Abl était la partie fission et INCL4.2, comme Isabel, pouvait traiter les nucléons, pions, deutons, tritons, Helium-3 et  $\alpha$  en entrée. De plus, l'implantation avait été prévue dès l'origine telle que INCL4.2 et Abl étaient dissociées, ce qui permettait d'augmenter le nombre de combinaisons possibles cascade-déexcitation, et, point le plus important à long terme, INCL4.2 et Abl étaient et sont toujours, eux, des codes en développement. De notre côté l'implantation nous permettait enfin une utilisation sur des cibles épaisses et/ou complexes, pour se comparer à des expériences comme celles faites à SATURNE sur l'émission de neutrons (ex. : fig. 1.12) ou de les utiliser dans des simulations (ex. : fig. 1.13). Si pour les neutrons les différences sont très faibles, ce n'est pas du tout le cas pour les noyaux résiduels. Les chapitre 2 et 3 abordent plus en détail tout l'apport de INCL4.2 et Abl dans les codes de transport. L'autre raison pour laquelle cette implantation était intéressante est qu'ainsi nos codes pouvaient être mis à disposition du public de manière simple et large. Le corollaire de ce dernier point est leur pérennisation.

A priori l'implantation n'a rien de bien compliqué. Il suffit de créer les interfaces qui conviennent entre le code de transport (ici LAHET) et les codes de réactions (INCL4.2 et Abl). Une interface pour donner les informations d'entrée au code de réaction et une pour passer les résultats du code de réaction au code de transport. A ceci s'ajoutent les routines d'initialisation de chaque code où la encore les informations de bases doivent être transcrites pour les codes appelés. Une connaissance minimum de tous les codes en présence est évidemment nécessaire. Ce travail a été facilité par les discussions avec R. E. Prael, développeur de LAHET, venu en mars 2001 au CEA Saclay.

LAHET comme INCL4.2 et Abl sont programmés en Fortran 77, c'est au moins ça. Cependant bien d'autres détails sont ensuite à régler. Si en faire une liste n'apporte rien aujourd'hui aux résultats, en donner quelques exemples permet de

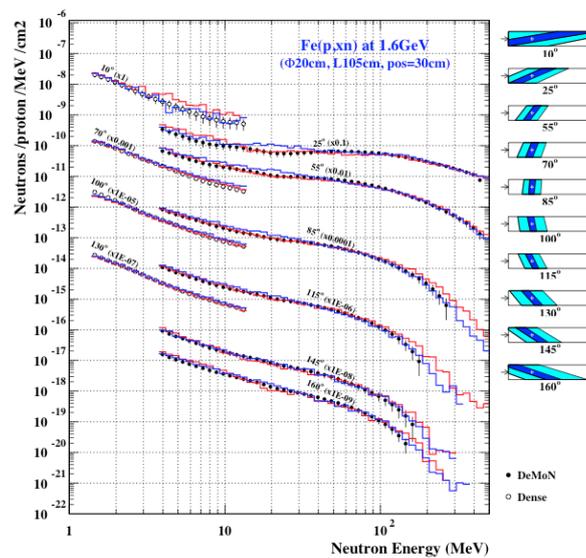


FIGURE 1.12 – Spectres de neutrons obtenus à SATURNE par un faisceau de proton de 1.6 GeV sur un cylindre de fer de diamètre 20 cm et de longueur 105 cm. La partie vue par le détecteur est donnée pour chaque angle à droite de la figure. Calculs faits avec INCL4.2-Abla (rouge) et Bertini-Dresner-RAL (bleu) dans LAHET3.16. Figure tirée de (David et al. 2003)

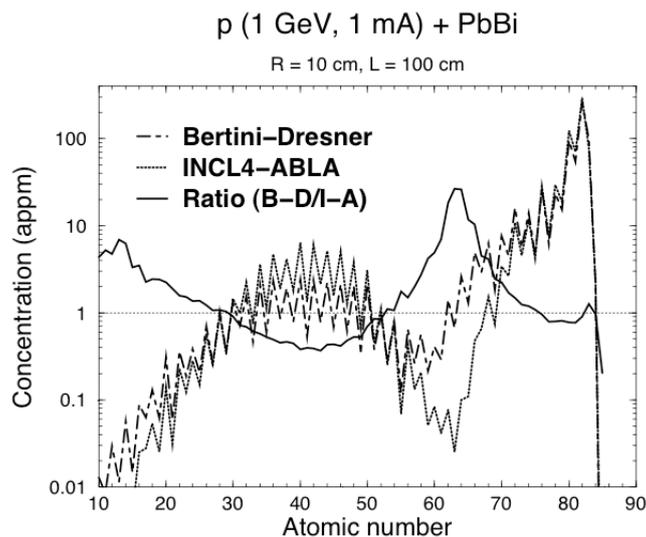


FIGURE 1.13 – Calculs faits avec LAHET3.16 de concentrations en appm (Atomic Parts Per Million) des différentes impuretés chimiques produites par spallation dans une cible de Pb-Bi après un an d'irradiation. INCL4.2-ABLA (pointillé), Bertini-Dresner-RAL (pointillé-tiret) et le rapport entre les deux calculs (plein). Figure tirée de (Donadille et al. 2003)

mieux comprendre l'oxymore utilisé en tout début de chapitre (page 3) : *s'ouvrir à d'autres contraintes*.

Il y a bien sûr des classiques, comme le passage d'informations entre variables en simple ou double précision et par conséquent les noms de fonctions associées. Les générateurs de nombres aléatoires doivent permettre de retracer tout événement suspect, donc leur utilisation doit être cohérente, si plusieurs sont utilisés. Le conflit des noms de variable est aussi source de troubles. Plus spécifiques à cette implantation je citerai trois problèmes pas trop compliqués à résoudre une fois qu'on en a conscience...

Le premier est lié au fait que LAHET peut imposer au code de réaction de lui fournir un résultat. À ce sujet deux cas se sont présentés. D'abord LAHET par défaut oblige au code de cascade de capturer les  $\pi^-$  dont l'énergie est sous un certain seuil. Le souci est que INCL4.2 n'obtenait que des cas transparents pour ces  $\pi^-$  de basses énergies, i.e. que INCL4.2 redonnait le  $\pi^-$  et LAHET rétirait sa demande. Une fois la raison trouvée, la solution fut simplement de changer pour l'utilisation d'INCL4.2 l'option par défaut en obligeant MCNPX à faire décroître le  $\pi^-$  sous ce seuil. Puis il y a les interactions auxquelles on ne pense pas lorsque l'on traite les réactions de spallation, comme l'interaction n+d qui plus est à basse énergie. Ainsi dans la version 4.2 de INCL les interactions à basses énergies, sous 100 MeV, avaient été considérées de manière ad-hoc en ce qui concerne la section efficace d'interaction. Évidemment le cas du deuton cible n'avait pas été spécifiquement regardé. On peut d'ailleurs se poser la question de l'adéquation d'un modèle de spallation à ce genre de réaction. Aussi, cette dernière ayant été étudiée de près par les développeurs de LAHET, on s'est aisément résolu à adopter leurs sections efficaces de capture n+d. Il faut noter que les réactions n+d à basses énergies (mais supérieures à 20 MeV, car en dessous c'est le module basse énergie, MCNP, qui le gère) peuvent se trouver notamment dans les sources de neutrons où l'eau lourde sert de ralentisseur aux neutrons.

Le deuxième problème est lié au fait que LAHET peut imposer au code de réaction de lui fournir une information. Ainsi, si dans le premier cas on a eu le problème de sections efficaces de réaction imposées par LAHET, dans celui-ci c'est exactement l'opposé, c'est à dire que LAHET n'ayant pas les sections efficaces de réactions réelles pour décider s'il y a réaction ou non, il utilise alors les sections efficaces géométriques et laisse au code de cascade la possibilité de faire des transparents<sup>17</sup>. LAHET a alors besoin que le code de cascade lui donne à l'initialisation les sections efficaces géométriques de toutes les réactions qui pourront être rencontrées. Ceci est le cas pour les d, t, Helium-3 et  $\alpha$  considérés comme projectiles. Prenant exemple sur Isabel, cette initialisation put se faire facilement.

Le troisième cas rejoint d'une certaine façon le cas de la réaction n+d, dans le sens où le domaine des réactions de spallation ne touche pas particulièrement les *petits* noyaux, mais que dans un code de transport toutes les réactions possibles doivent être prises en compte. Si tirer l'énergie cinétique des particules évaporées dans une maxwellienne en température est justifié à la vue des spectres expérimentaux et pour les noyaux les plus communément sujets à la spallation, on peut dans des cas exotiques arriver à des énergies non permises. Ainsi pour les petits noyaux heurtés par un projectile énergétique, l'énergie d'excitation par nucléon et la température peuvent atteindre des valeurs bien supérieures au cas des noyaux plus lourds ( $T^2 = E^*/a$ , où le paramètre de densité de niveau  $a$  est plus ou moins proportionnel à la masse  $A$  du noyau - page 21, tableau 1.1). Il devient alors bien plus

17. ... et ainsi imposer sa section efficace de réaction.

fréquent de tirer des énergies cinétiques élevées dans une maxwellienne à la queue de distribution longue, et même plus élevées que l'énergie disponible. Ceci a été corrigé de deux manières. La première a été de mettre une condition sur l'énergie cinétique des particules évaporées : elles ne doivent pas emporter plus d'énergie que celle disponible. La seconde a été de brancher à Abla le module de Fermi-Breakup (mécanisme expliqué page 26) disponible dans LAHET3.16 et utilisé par Dresner.

Enfin, tout ceci aboutira à l'implantation de INCL4.2 et Abla dans LAHET3.16 en 2002. À la même période le LCS sera définitivement fondu en MCNPX, sa version compacte. En fait la première version de MCNPX verra le jour en avril 1997 en parallèle du LCS. L'implantation de INCL4.2 et Abla dans MCNPX sera évidemment grandement simplifiée, profitant du travail fait dans LAHET3.16. MCNPX étant en Fortran 90, J. Hendricks de Los Alamos s'est chargé des modifications et c'est en 2003 dans la version  $\beta$  MCNPX2.5d qu'apparaîtra INCL4.2 et Abla. La sortie officielle se fera en 2005 dans MCNPX2.5 (Hendricks et al. 2005, Pelowitz 2005).

Des exemples de l'utilisation que nous avons faite de nos codes utilisables dans un code de transport sont reportés dans les chapitres suivants, que ce soit pour les tester, les valider, chapitre 2, ou pour les utiliser dans des simulations, chapitre 3. Savoir si d'autres personnes les ont aussi utilisés via MCNPX est plus difficile. Cependant nous savons qu'INCL4.2-Abla via MCNPX a été utilisé pour diverses applications, et je donne ci-dessous des exemples dans différents domaines :

- la création d'une bibliothèque d'activation Haute énergie (Korovin et al. 2010),
- l'étude de transmutation de déchets (Borger et al. 2011),
- l'étude d'ADS (Pohorecki et al. 2006) et
- le médical (Harvey et al. 2009).

### 1.5.2 MCNPX2.7-MCNP6

Les codes de spallation évoluent, s'affinent, s'étendent. C'est le cas d'INCL4 et d'Abla, et cela en continue. Que ce soit après l'implantation, comme pendant. Vers 2008 INCL4 et Abla ont abouti à des versions apportant de notables améliorations et/ou extensions : INCL4.5 et Abla07. En 2009 on décida, en accord avec les développeurs de MCNPX, d'implanter ces nouvelles versions dans MCNPX2.7. Une des raisons était la promesse faite dans un projet européen (Nudatra (David et al. 2008)) de tester l'apport des nouvelles versions d'INCL4 et Abla sur la cible Megapie en comparant aux résultats obtenus avec les anciennes versions dans MCNPX2.5.

Les différents codes en question, INCL4.2, Abla et MCNPX, ayant chacun de leur côté bien évolué, en contenu et parfois structure, il a fallu reprendre l'implantation. Pour des raisons pratiques et d'efficacité le travail fut vite mis sur les rails grâce à la collaboration étroite que j'ai eu avec J. Hendricks pendant deux séjours à Los Alamos. Ainsi une version privée a pu être mise au point rapidement et les calculs pour Megapie être fournis au printemps 2010. Par la suite des détails à régler dans nos codes<sup>18</sup> et l'évolution des codes MCNPX et MCNP ont reporté la mise à disposition des nouvelles versions dans MCNPX2.7-MCNP6.

18. ce qui aboutira à INCL4.6

Pour les détails à régler nous pouvons par exemple citer le cas des projectiles composites de basse énergie pour INCL4.5 et pour Abl07 des problèmes de conservation dans le module de multifragmentation. Une fois encore, pour prendre INCL4.5, le souci mis en lumière est lié à l'utilisation des modèles de spallation sur des sujets qui ne sont pas leur domaine de prédilection. Ainsi, profitant des nouvelles versions dans une version  $\beta$  de MCNPX2.7, une étude de production d'At dans une cible de Pb-Bi a mis en évidence l'importance des  $\alpha$  de basse énergie (énergie cinétique totale inférieure à 100 MeV) produits par réaction primaire de spallation avec des protons de l'ordre du GeV et interagissant ensuite avec le Bi. Cette étude est détaillée au chapitre 3, page 116.

En ce qui concerne MCNPX la version officielle 2.7 a dû sortir en avril 2011, sans nos codes. La raison était à la fois le manque de temps de l'équipe MCNPX pour faire les tests nécessaires, et aussi le fait que MCNPX et MCNP allaient se recombinaient. Après la création de MCNPX les deux codes MCNPX et MCNP ont vécu et évolué comme deux codes différents. MCNPX2.7 est donc la dernière version de MCNPX et MCNP6 incorporera toutes ses fonctionnalités et pourrait sortir en incluant INCL4.6 et Abl07.

### 1.5.3 Autres codes de transport de particules

D'autres codes de transport de particules dans le domaine de la spallation existent. Je donne ci-dessous les trois autres codes dans lesquels INCL4 et parfois Abl ont été implantés, sont en cours d'implantation ou pourraient être implantés. Je ne fais que les mentionner, car mon implication a été moindre.

#### Geant4

GEANT4 (GEometry ANd Tracking) est un code de transport ou plus exactement une boîte à outils permettant le suivi des particules à travers la matière. En forçant exagérément le trait je dirais que GEANT4 est à MCNPX ce que  $\LaTeX$ <sup>®</sup> est à Word<sup>®</sup><sup>19</sup>. En fait de manière à étendre la disponibilité d'INCL il a été décidé de l'implanter dans GEANT4. La partie importante du travail a été de transcrire INCL en C++, puisque GEANT4 n'accepte pas le Fortran77. Ce travail a été fait d'abord par P. Kaitaniemi (Kaitaniemi et al. 2011) qui a adapté INCL4.2 en C++, puis par D. Mancusi qui a réécrit une version très proche de INCL4.5 en C++. Ainsi la version GEANT4 9.5.0 contenait la version INCL4.2 (à laquelle la possibilité d'avoir des projectiles plus lourds que l' $\alpha$  a été ajoutée) ainsi qu'une version très proche de INCL4.5. Récemment, en décembre 2012, la version GEANT4 9.6 ne proposait plus qu'une seule version d'INCL, appelée INCL++, pendant de INCL4.6 en C++.

#### PHITS

PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) (Niita et al. 2010) est un code de transport japonais qui a de grandes similitudes avec MCNPX, du fait qu'il a les mêmes origines : le code NMTC (qui donnera HETC, qui donnera LAHET à LANL). Évidemment les modèles ont évolué différemment depuis. En 2011 les développeurs de PHITS ont souhaité inclure INCL4 dans leur code. Les structures de PHITS et de MCNPX n'étant pas trop éloignées, et les deux étant

<sup>19</sup>. pour ce qui est du rapport à l'outil

écrits en fortran, le travail nécessaire à l'insertion dans MCNPX a été envoyé aux développeurs de PHITS qui se sont chargés de l'implantation proprement dite. Des premiers résultats ont été présentés à la conférence *ICRS-12 & RPSD-2012* à Nara au Japon en septembre 2012 (Hashimoto et al. 2012).

## MARS

Enfin il y a le code MARS (Math Analysis by Random Sampling) (Mokhov 1995) développé au Fermilab par N. Mokhov et plus souvent utilisé aux énergies de la physique des particules. Il incorpore un module traitant le domaine de la spallation, mais traite souvent des énergies plus élevées. En 2011 Sophie Pedoux a soutenu à L'université de Liège une thèse sur l'extension d'INCL4.2 jusqu'à des énergie de 12 GeV environ. L'idée de S. Pedoux et J. Cugnon était de prendre en compte l'effet dominant, c'est à dire la production de pions multiples, sans se soucier des voies intermédiaires que sont les résonances (détails, voir section 4.3, page 127). Les résultats des travaux publiés (Pedoux 2011, Pedoux et Cugnon 2011) ont amené N. Mokhov, rencontré à diverses conférences, à me demander la possibilité d'utiliser cette version haute énergie d'INCL4.2 pour la tester sur la conception d'une nouvelle installation au Fermilab, passant de l'ère frontière en énergie, après l'arrêt du Tevatron, à l'ère frontière en intensité. Le problème est justement les rendements de production des particules dans le domaine 1-10 GeV. Si les tests sont concluants, cette version sera incluse dans MARS.

## CONCLUSION DU CHAPITRE

Par le prisme de l'implantation des modèles INCL4 et Abla dans les codes de transport de particules, c'est la diversité des thèmes qui habitent et gravitent autour des réactions de spallation que j'ai voulu mettre en lumière. Ce chapitre a pour but de montrer ces réactions et surtout leur modélisation sous différents aspects : historique, sémantique, cognitif et applicatif ; ces thèmes sont abordés de manière synthétique, sans entrer dans les détails, car ce n'est pas un article de revue, mais en cherchant cependant à n'omettre aucun élément essentiel. Ce chapitre peut aussi être vu comme une introduction *approfondie* aux chapitres suivants. La connaissance de la physique se trouvant dans les différents codes de spallation est nécessaire à l'analyse de leur validation et intercomparaison faite au chapitre 2, ainsi qu'à la critique des résultats de simulations du chapitre 3. Enfin, les futurs axes de recherche, chapitre 4, ne peuvent que s'appuyer sur des bases solides<sup>20</sup>.

---

20. [...] *les conseils pour l'avenir, c'est du passé qu'ils viennent.* (Sénèque le Jeune - Lettre à Lucilius - LETTRE LXXXIII)



**L**a validation des modèles de spallation, comme de tout modèle de physique, est une étape importante pour connaître la valeur de la modélisation. Cependant, lorsque l'on baigne dans le développement de modèles, dans l'utilisation de ceux-ci à des fins précises et pratiques, et que l'on a contribué à l'organisation d'une *validation* à laquelle la quasi-totalité des modèles de spallation existants a participé, on se doit avant toute chose de définir plus précisément ce que l'on entend par *validation*.

Valider peut se comprendre de deux façons légèrement différentes suivant que c'est une fin ou un début. Je m'explique. Le développeur de modèle se fixe des objectifs à atteindre, il cherche à reproduire telles ou telles observables, et une fois le modèle construit il le teste sur des données expérimentales pour juger de ses performances, pour voir si les mécanismes pris en compte rendent compte de la réalité, et dans ce cas l'approche globale et qualitative est importante. L'utilisateur du modèle comme outil est, lui, soucieux de savoir, avant de procéder aux calculs, quels sont les modèles les plus dignes de confiance pour le sujet qui l'intéresse et quels sont les marges d'incertitude. L'approche est plus ciblée et quantitative.

J'ai eu à valider ou participer à des validations de modèles de nombreuses fois, mais parler de chacune dans le détail ne serait qu'une compilation d'articles, de rapports et de notes. Aussi j'ai préféré dans ce chapitre synthétiser les travaux et ne développer que trois thèmes. Ainsi la première partie reprend dans les grandes lignes les validations passées au fur et à mesure du temps et suivant des objectifs différents. La deuxième partie est consacrée à l'intercomparaison de modèles de spallation la plus complète jusqu'à ce jour. Enfin, la troisième présente deux validations dans le cas de cibles épaisses, c'est à dire nécessitant l'utilisation du modèle de spallation dans un code de transport de particules.

Pour des raisons de mise en page certaines figures sont parfois petites, aussi des versions agrandies sont reportées dans l'annexe A.1, page 138.

## 2.1 HISTOIRES DE VALIDATIONS

L'Agence pour l'Énergie Nucléaire de l'OCDE (NEA/OECD en anglais) a lancé dans les années 90 trois exercices de comparaison de codes dans le domaine de la spallation. Le but était de faire un état des lieux des outils modélisant les réactions de spallation pour la conception des systèmes pilotés par accélérateurs (ADS), utiles à la transmutation des déchets nucléaires. Deux exercices concernaient des cibles minces (Blann et al. 1993, Michel et Nagel 1997), donc la réaction de spallation en elle-même, et un exercice des cibles épaisses (Filges et al.

1995), donc le résultat de cascades de réactions de spallation et par conséquent l'utilisation d'un code de transport. Les exercices sur les cibles minces ont attiré environ une vingtaine de participants chacun. Chronologiquement le premier (Blann et al. 1993) traitait des neutrons et protons émis, alors que le second (Michel et Nagel 1997) s'occupait des noyaux résiduels. Celui sur les cibles épaisses a vu la participation d'une dizaine de modèles. À l'issue de ces trois exercices plusieurs conclusions ont pu être tirées. Le premier constat était qu'il y avait de la place pour des améliorations dans tous les modèles. Une évaluation de plusieurs modèles sur un certain nombre d'observables différentes avec des cibles et énergies différentes est toujours difficile, car rares sont les cas où un modèle est en tout point meilleur qu'un autre et les données expérimentales ne sont pas toujours assez nombreuses pour couvrir l'ensemble du spectre des réactions et observables possibles. D'ailleurs ces exercices pointèrent aussi du doigt le manque de données expérimentales.

Après ce constat la connaissance et la simulation des réactions de spallation ont pu connaître des avancées significatives en Europe, grâce notamment à des projets successifs ayant pour thème la transmutation des déchets nucléaires et les systèmes pilotés par accélérateurs (ADS). Ces projets comprenaient, et comprennent encore puisque le dernier est toujours en cours, des expériences destinées à grossir le nombre de données ainsi que l'amélioration des modèles de spallation. Dans le cinquième programme-cadre (FP5, pour *Framework Programme* en anglais) il y eut le projet HINDAS (**H**igh and **I**ntermediate Energy Nuclear **D**ata for **A**ccelerator Driven **S**ystem), dans le sixième, NUDATRA (**N**uclear **D**ata for **T**Ransmutation) et dans le septième, il y a en cours ANDES (**A**ccurate Nuclear **D**ata for Nuclear Energy Sustainability).

Dans HINDAS, comme dans les deux autres projets, un constat des performances des modèles était fait en début d'exercice, que ce soit des difficultés à reproduire des données expérimentales existantes ou une dispersion des prévisions de différents modèles sur des observables où peu ou pas de données expérimentales existent, puis des points spécifiques à améliorer étaient décidés. À la fin du projet les modèles étaient testés notamment sur les nouvelles données obtenues. Les codes de spallation qui furent améliorés étaient INCL et Abl pour donner les versions INCL4.2 et Abl décrites dans le chapitre précédent (respectivement pages 27 et 33). Cette combinaison de codes a montré de sérieux progrès dans la simulation de la spallation. On peut citer, entre autres, pour INCL4.2 la capacité à reproduire la section efficace de réaction du fait d'une surface nucléaire diffuse, contrairement à INCL2, et pour Abl une très bonne reproduction des produits de fission. Plus de détails se trouvent dans les références (Boudard et al. 2002, Meulders et al. 2005). C'est aussi dans ce projet que les codes INCL4.2 et Abl ont été implantés dans le code LAHET3.16. Ainsi des comparaisons ont pu être faites entre la combinaison de ces deux codes et les données en cibles épaisses de production de neutrons obtenues à SATURNE (David et al. 2003). Ce sujet est développé dans la section 2.3.1

À l'issue de HINDAS on disposait de deux codes, INCL4.2 et Abl, qui donnaient globalement de bons résultats, sans paramètres libres, mais qui pouvaient encore être améliorés. Ainsi deux défauts principaux étaient à corriger : la production de particules légères chargées (jusqu'à l' $\alpha$ ) et la production des noyaux dits de masse intermédiaire (disons de masse  $A \leq 20$ ). Ce travail fut mené dans le cadre du projet NUDATRA. Du côté de INCL4.2 la mise en place d'un processus de coalescence (voir section 1.3.7, page 32) permit la production de particules composites

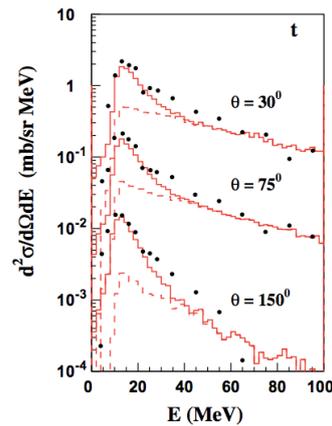


FIGURE 2.1 – Sections efficaces doublement différentielles de production de tritium dans la réaction  $p + Ta$  à 1.2 GeV. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07 (courbe pleine) et de INCL4.5 seul (courbe tiretée). Des facteurs multiplicatifs différents ont été affectés aux différents angles pour des raisons de clarté. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010).

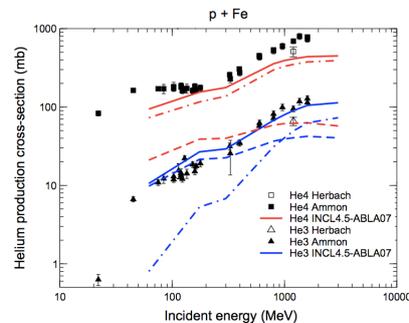


FIGURE 2.2 – Sections efficaces de production  $d^3He$  (courbes bleues) et  $\alpha$  (courbes rouges) par des protons sur le fer. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et (Ammon et al. 2008), et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07. Les courbes pleines représentent le résultat total, les courbes tiretées la contribution d'INCL4.5 et les courbes point-tiret la contribution d'Abla07. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010).

et dans Abla l'évaporation de nucléons et d' $\alpha$  fut étendu à l'émission de tout type de particules et noyaux (voir sections 1.4.1 et 1.4.3, pages 34 et 42). Deux figures illustrent les résultats obtenues. La figure 2.1 montre le spectre des tritium produits dans la réaction  $p(1.2\text{GeV}) + Ta$  et la figure 2.2 les fonctions d'excitation de production d' $\alpha$  et d' $^3He$  dans la réaction  $p + Fe$ . Un des objectifs de NUDATRA était aussi la mise en évidence des améliorations des modèles sur les calculs de la cible Megapie. Ce point est abordé au chapitre 3, section 3.2.2 (page 111), et montrera l'intérêt d'un modèle complet par l'exemple de l'influence de l' $^3He$  sur la production de tritium.

Un peu après le projet NUDATRA il fut décidé, au sein du projet ANDES, de tester les codes sur un domaine spécifique d'énergie, c'est à dire dans la gamme 150-600 MeV. Cette gamme correspond à celle du futur prototype de système piloté par accélérateur (ADS) Myrrha, prévu à Mol en Belgique. On a utilisé les résultats du projet *Benchmark of spallation models*, que je développe dans la section 2.2 suivante, auxquels on a ajouté de nouvelles données expérimentales correspondant aux énergies en question. Le détail de ces tests surtout faits pour INCL4.5-Abla07 sont publiés dans un rapport ANDES (David et al. 2011b). Les conclusions

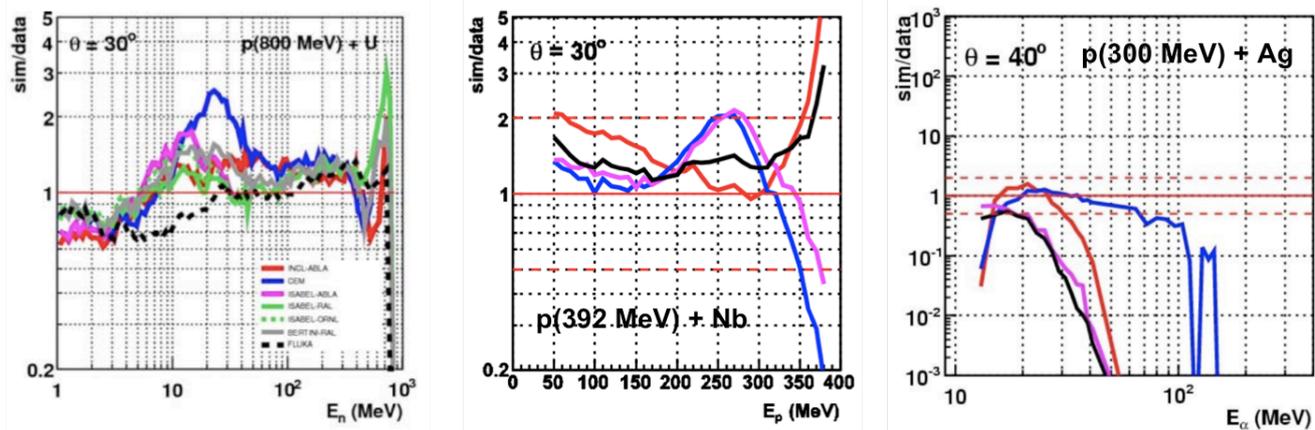


FIGURE 2.3 – De gauche à droite les rapports calcul/mesure pour des spectres en angle et énergie de neutrons, protons et  $\alpha$  aux alentours de  $30^\circ$ . Les cibles et les énergies de projectiles sont différentes pour des raisons de disponibilités de données expérimentales. Ces figures sont tirées de (Rapp et al. 2006).

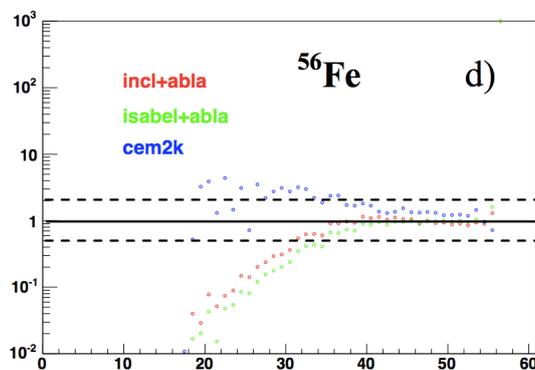


FIGURE 2.4 – Les rapports calcul/mesure pour la distribution en masse des noyaux résiduels produits par la réaction  $^{56}\text{Fe}(1\text{A.GeV}) + p$ . Cette figure est tirée de (David et al. 2007a).

ont indiqué de bons résultats, même si des défauts restaient à corriger et concernaient : i) le pic quasi-élastique des particules émises à l'avant, ii) un trou dans le spectre de neutron à environ 10 MeV, iii) des noyaux de masse intermédiaire globalement bien reproduits, du fait d'une compensation entre une surestimation de INCL4.5 et une sous-estimation de Abla07. Des solutions sont recherchées pour corriger ces points au cours de ce projet ANDES. Le point ii) a déjà été résolu. Ce trou aux alentours de 10 MeV venait d'une contrainte mise dans INCL4.5 qui consistait à ne plus considérer comme participant dans la cascade les nucléons dont l'énergie descendait sous un seuil. Ce seuil mis à 10 MeV permettait d'améliorer la production des noyaux de masses proches de la cible, mais il s'est révélé que si l'idée était juste, le seuil devait être dépendant du noyau. Ainsi en considérant un seuil égal au  $2/3$  de la barrière coulombienne les résultats souhaités ne sont pas détériorés, au contraire, et le trou à 10 MeV a disparu.

Dans ces trois projets européens nous avons testé les modèles en tant que développeur principalement. Comme il a été dit en introduction, on peut aussi tester des modèles avec pour objectif non pas de les améliorer par la suite, mais de les utiliser de la meilleure manière qu'il soit, i.e. de choisir le modèle le plus adéquat et d'en connaître les incertitudes sur le sujet précis qui importe. On a notamment dû faire ce travail pour le projet EURISOL-DS (**EUROPEAN Isotope Separation On-Line**

Radioactive Ion Beam Facility - Design Study) qui se passa de 2005 à 2009. Les résultats de ces tests sont publiés dans trois notes (Rapp et al. 2006, David et al. 2007a;b). Les figures 2.3 et 2.4 montrent les rapports calcul/mesure obtenus pour la production de particules et pour la production de noyaux résiduels avec différents modèles. Ce travail avait permis de faire ressortir les deux ou trois modèles globalement meilleurs que nous utilisâmes ensuite pour définir et caractériser les cibles, mais il mit aussi en évidence des lacunes pour chacun des modèles retenus, dont certaines vues dans les projets précédemment cités : les neutrons mieux reproduits que les protons, eux mêmes mieux reproduits que les  $\alpha$ , et la difficulté de reproduire les noyaux de masse éloignée de celle de la cible. Un autre point important était la difficulté à quantifier les incertitudes associées aux modèles. Si ces rapports calcul/mesure sont de bons indicateurs, il faut bien garder à l'esprit ce qu'il signifie. Ainsi l'importance de ces rapports doit évidemment être pondérée du poids ou de la section efficace qu'ils représentent. Cette difficulté est développée dans la section suivante 2.2.

Dans toutes ces campagnes de tests, de comparaisons, notre groupe s'est évidemment beaucoup focalisé sur INCL4.2 et INCL4.5 avec Abla et Abla07, mais pas seulement, comme le montre les figures 2.3 et 2.4. Cependant, depuis les trois exercices de comparaisons des années 90 orchestrés par l'Agence pour l'Énergie Nucléaire, de nombreux modèles s'étaient développés et améliorés, en lien avec de nombreuses nouvelles données expérimentales. Aussi, trois instituts décidèrent de relancer ce genre d'exercice, pour les cibles dites minces, sous l'égide de l'AIEA (Agence Internationale pour l'Énergie Nucléaire) : Le CEA, Soreq et FZJ. Ce projet étant jusqu'à ce jour le plus complet en ce qui concerne l'état des lieux des modèles de spallation et m'y étant particulièrement impliqué, il fait le sujet d'une section entière ci-après, 2.2. On verra plus loin dans la section 2.3.2 que ce genre d'exercice pour les cibles dites épaisses, s'il est très intéressant, nécessite d'associer un code de transport de particules et donc le nombre de participants se réduit considérablement.

## 2.2 CIBLES MINCES - LA RÉACTION DE SPALLATION

### EXEMPLE D'UN TEST GÉNÉRAL : *Benchmark of spallation models*

Tenter de faire l'état des lieux des modèles de spallation utilisés à travers le monde est un projet ambitieux et risqué à bien des égards :

- balayer l'ensemble des domaines des réactions de spallation (types de projectile, énergies du projectile, types de noyau cible, observables),
- avoir tous les modèles existants ou presque qui participent,
- faire faire à tous les participants les mêmes calculs avec des formats de sortie identiques,
- mettre en place les outils utiles à l'analyse des résultats,
- utiliser ces outils,
- faire l'analyse la plus complète possible,
- que l'exercice soit profitable à tous, développeurs et utilisateurs, et
- qu'il puisse être renouveler ultérieurement en bénéficiant des moyens déjà mis en place.

Les quatre premiers points sont abordés dans la section 2.2.1 et les points suivants dans la section 2.2.2.

### 2.2.1 Mise en place

Un premier workshop a été organisé à Trieste en février 2008 pour définir le contenu de ce *benchmark*. Il a rassemblé les développeurs qui ont présenté leur modèle, ainsi que les expérimentateurs qui, eux, ont fait un bilan des données existantes. Le premier résultat tangible de ce workshop est un rapport (Filges et al. 2008) dans lequel on trouve notamment la description détaillée de nombreux modèles. L'autre point important a été le compromis sur les données expérimentales qui furent utilisées pour les comparaisons. Le but était de couvrir le spectre le plus large des réactions de spallation tout en prenant en compte deux contraintes : la disponibilité des données et la quantité de travail que cela allait engendrer pour les participants et les organisateurs.

Prenant en compte ces objectifs et contraintes, il a été décidé de ne considérer que les nucléons comme projectiles, principalement le proton, d'aller de 20 à 3000 MeV en énergie incidente, d'avoir des masses de noyaux cibles assez différentes, et d'étudier comme observables les spectres de neutrons, protons, deutons, tritons,  $^3\text{He}$ ,  $\alpha$  et pions, les multiplicités de neutrons, les distributions isotopiques, en masse et en charge des noyaux résiduels, et les productions isotopiques en fonction de l'énergie du projectile (fonctions d'excitation). Les figures 2.5, 2.6 et 2.7 donnent la liste des réactions considérées suivant les observables. Ces données ont été alors mis dans un format simple, format ASCII, afin d'être facilement utilisables pour ce *benchmark* et pour tous, car les fichiers ont été mis à disposition via un site web créé pour l'occasion (<http://www-nds.iaea.org/spallations/>). À chacun de ces fichiers a été associé un autre fichier synthétisant les informations nécessaires sur les conditions d'expérience. En ce qui concerne la gamme en énergie considérée, l'intérêt des énergies inférieures à  $\sim 150$  MeV vient du fait qu'un modèle de spallation, s'il est utilisé dans un code de transport, peut être appelé pour des projectiles à des énergies où il n'existe pas de base de données, et notamment aux basses énergies. Aussi il est intéressant de connaître le comportement des modèles dans ces domaines exotiques pour la spallation.

Toute personne participant devait s'engager à :

- faire les calculs pour toutes les réactions mentionnées, pour que l'exercice soit complet et cohérent,
- fournir les résultats sous un format spécifique donné par les organisateurs, pour faciliter la mise en place des outils d'analyse,
- donner une description de leur modèle avec les ingrédients et paramètres, ainsi que des informations complémentaires pour chaque calcul (section efficace de réaction, caractéristiques du noyau à l'issue de la première phase de la réaction, etc.), pour aider à l'analyse.

Dans le cas particuliers des fonctions d'excitation il était convenu que les participants devaient fournir uniquement les sections efficaces de production directes (ou indépendantes), bien que les données expérimentales comprennent également des productions cumulatives qui prennent en compte les ascendants radioactifs dans la production de certains isotopes. Le même modèle pour le calcul des sections efficaces cumulatives a été utilisé pour tous les modèles de spallation participants et était fourni par les organisateurs, et ce pour éviter des biais dans l'analyse sur ces observables. Ce modèle de sections cumulatives est abordé dans le chapitre 3, section 3.1.2 (page 94). Enfin un ensemble additionnel de données avait été préparé pour tous les participants désireux d'aller au-delà du jeu de données obligatoire,

Beam	Target	Energy [MeV]
n	Fe	65
p	Fe	800
p	Fe	1200
p	Fe	1600
p	Fe	3000
p	Pb	63
p	Pb	256
p	Pb	800
p	Pb	1200
p	Pb	1600
p	Pb	3000

Beam	Target	Energy [MeV]	Emitted particles
n	Bi	542	p, d, t
p	Al	160	$\alpha$
p	Fe	62	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$
p	Ni	175	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$ , p
p	Ta	1200	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$
p	Au	160	$\alpha$
p	Au	1200	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$
p	Au	2500	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$
p	Pb	63	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$
p	Pb208	800	p
p	Bi	62	p, d, t, $^3\text{He}$ , $\alpha$

Beam	Target	Energy [MeV]	Emitted particles
p	C	730	$\pi^+$ , $\pi^-$
p	Al	730	$\pi^+$ , $\pi^-$
p	Cu	730	$\pi^+$ , $\pi^-$
p	Pb	730	$\pi^+$ , $\pi^-$
p	Al	2205	$\pi^-$

FIGURE 2.5 – Liste des spectres de particules expérimentaux utilisés pour le benchmark. De gauche à droite : les neutrons, les particules légères chargées et les pions. Cette figure est tirée du site web AIEA <http://www-nds.iaea.org/spallations/>.

Beam	Target	Energy [MeV]
p	Fe	800, 1200, 1600
p	Pb	800, 1200, 1600
p	Fe	1200
p	Pb	1200

FIGURE 2.6 – Liste des distributions de multiplicités et multiplicités moyennes de neutrons expérimentales utilisées pour le benchmark. Cette figure est tirée du site web AIEA.

Beam	Target	Energy [A MeV]
Fe	H	300
Fe	H	1000
Pb	H	500
Pb	H	1000
U	H	1000

Beam	Target	Energy [MeV]
p	Fe	20 to 3000
p	Pb	20 to 3000

FIGURE 2.7 – Liste des données expérimentales sur les noyaux résiduels utilisés pour le benchmark. À gauche les distributions isotopiques, desquelles on tire les distributions en masses et en charges, et à droite les fonctions d'excitation. Cette figure est tirée du site web AIEA.

Codes	Representatives	Neutron	Neutron Multiplicity	Light Charged Particles	Pion	Residue	Excitation Function
cem03-02	A. Sierk, S. Mashnik K. Gudima, M. Baznat						
cem03-03	K. Gudima, M. Baznat S. Mashnik, A. Sierk						
cascade-04	H. Kumawat						
phits-jam	N. Matsuda						
phits-bertini	N. Matsuda						
phits-jqmd	N. Matsuda						
isabel-smm	D. Mancusi						
isabel-gemini++	D. Mancusi						
geant4-bertini	Geant4 Hadronic Group						
geant4-binary	Geant4 Hadronic Group						
cascade-asf	A. Konobeyev						
incl4.5-ablo7	D. Mancusi						
incl4.5-smm	D. Mancusi						
isabel-ablo7	D. Mancusi						
incl45-gemini++	D. Mancusi						
cascade-x	Yu. Korovin						
mcnp-x-bert	F. Gallmeier						

FIGURE 2.8 – Liste des participants et des calculs fournis suivant les observables. La couleur verte indique que les calculs ont été fournis pour l'observable et la couleur rouge qu'ils n'ont pas été fournis. Cette figure est tirée du site web AIEA <http://www-nds.iaea.org/spallations/>.

mais aucun n'en parlera. Ce dernier point n'affectera nullement l'objectif visé, car les nombreux participants joueront le jeu sur l'ensemble des calculs à de très rares exceptions près (Fig. 2.8).

Les moyens techniques pour mener à bien ce projet étaient :

- la mise en place d'un site Web basé à l'AIEA,
- la création des figures comparant calculs et mesures,
- le calcul de facteurs de déviation appelé en anglais *figures of merit (FoM)* et les figures associées.

Le site Web a été initié par Alberto Mengoni, puis Mayeen Khandaker, un post-doc que j'encadrais, et moi-même l'avons développé et mis à jour<sup>1</sup>. Les deux objectifs de ce site étaient de mettre à disposition de toute la communauté le travail accompli pendant ce *benchmark* (les données expérimentales, les résultats de calculs (fichiers en format ASCII, les figures et les *FoM*), les outils (traçages de figures), les présentations lors des réunions) et qu'il soit une base pour pérenniser cette activité de validation/comparaison des codes de spallation. Les figures comparant les résultats de calcul et les données expérimentales étaient de deux sortes : un modèle comparé aux données et tous les modèles comparés aux données. Les outils développés permettent en fait de choisir librement le ou les modèles que l'on veut comparer. Cela sera utilisé pour l'analyse des neutrons (section 2.2.2). Les *FoM* méritent qu'on s'y attarde un peu, car ils sont symptomatiques de l'objectif visé lorsque l'on valide, teste, compare un modèle avec des données expérimentales.

1. Une refonte récente (fin juin 2012) a été faite par Naohiko Otsuka de l'AIEA. Ceci explique des formats différents des figures montrées dans ce mémoire, qui étaient les figures et tableaux originaux.

Ceux que l'on a utilisés sont les facteurs suivant :

$$\begin{aligned}
 R &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{exp}} \\
 H &= \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{calc}}{\Delta\sigma_i^{exp}} \right)^2 \right)^{1/2} \\
 F &= 10 \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\log(\sigma_i^{exp}) - \log(\sigma_i^{calc})]^2 \right)^{1/2} \\
 S &= 10 \left( \frac{\sum_{i=1}^N \left| \frac{\log(\sigma_i^{calc}) - \log(\sigma_i^{exp})}{(\Delta\sigma_i^{exp} / \sigma_i^{exp})} \right|^2}{\sum_{i=1}^N \left( \frac{\sigma_i^{exp}}{\Delta\sigma_i^{exp}} \right)^2} \right)^{1/2} \\
 M &= \min \left\{ \sum_{i=1}^N \sigma_{exp} \log \left( \frac{\sigma_{exp}}{\sigma_{calc}} \right), \sum_{i=1}^N \sigma_{calc} \log \left( \frac{\sigma_{calc}}{\sigma_{exp}} \right) \right\} \\
 P_x &= \frac{N_x}{N} \quad (\text{avec } N_x \text{ le nombre de points } i \text{ tels que } \frac{1}{x} < \frac{\sigma_i^{calc}}{\sigma_i^{exp}} < x)
 \end{aligned}$$

où  $\sigma_i^{exp}$  ( $\sigma_i^{calc}$ ) est la section mesurée (calculée),  $\Delta\sigma_i^{exp}$  l'incertitude expérimentale et N le nombre de points expérimentaux. Chacun de ces coefficients fait ressortir une qualité particulière du résultat de calcul.  $R$  est le simple rapport moyen, mais n'est pas symétrique et est dominé par la surestimation,  $H$  est le  $\chi^2$  moyen,  $F$  est une version symétrique de  $R$ , i.e. sur-et sous-estimation traitées sur un pied d'égalité,  $S$  reprend  $F$  en prenant en compte le poids des erreurs expérimentales relatives,  $M$ , appelé *intrinsic discrepancy* (différence intrinsèque) (Michel 2009), peut-être vu comme le facteur  $F$ , mais avec une prise en compte de la forme de la distribution, et enfin  $P_x$  qui lui permet aux utilisateurs d'avoir une première idée de l'incertitude à associer à un calcul donné. Le reproche souvent fait à ces *FoM*, et aux figures qui leur sont associés, est qu'ils viennent s'ajouter aux autres nombreuses figures. Dans les faits ils n'ont pas été très utilisés. Sur le sujet mon point de vue a toujours été le même. Ces *FoM* sont des outils supplémentaires pour l'analyse, et comme tels ils ne doivent être utilisés que si le but recherché en tire profit. Les figures classiques comparant les résultats de calcul aux données expérimentales d'une observable peuvent être vues comme une approche globale et qualitative. Les *FoM* sont eux quantitatifs, mais focalisés sur une caractéristique les définissant.

Pour finir à propos de la logistique, à mi-parcours de ce *benchmark* il y a eu un workshop en parallèle de la conférence AccApp'09 (*Accelerator Application*) à Vienne (Autriche) en mars 2009. Il a été l'occasion de faire le point sur les outils mis en place, de voir les tout premiers résultats de certains participants et d'arrêter le mois de février 2010 pour la tenue d'un workshop où les résultats et leurs analyses seront présentés.

### 2.2.2 Résultats - Analyses

C'est donc du 8 au 11 février 2010 que s'est tenu au CEA-Saclay le workshop *Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*. Durant ce workshop une analyse globale des résultats a été montrée et chaque participant a pu discuter des résultats de son propre modèle avec les succès et les points à

améliorer. En annexe A.2 se trouve le programme de ce workshop. Dans cette section je rapporte les principaux résultats obtenus. Les conclusions tirées et les enseignements acquis sur un tel exercice sont, elles, dans la section suivante.

Une page du site web est dédiée aux résultats des participants. Pour chaque observable un tableau donne accès au fichier ASCII fourni par le participant, aux figures comparant le modèle du participant aux données expérimentales et aux figures liées aux *FoM*. De plus une colonne "all models" donne accès aux figures comparant tous les modèles avec un jeu de données. Le tableau pour les sections efficaces doublement différentielles de production de neutrons est donné comme exemple sur la Figure 2.9. Si l'on ne pouvait qu'être satisfait du premier succès qui était à la fois la participation importante des développeurs de modèles de spallation, les résultats de dix sept modèles ou combinaisons de modèles ont été envoyés, et les calculs pour l'ensemble des voies demandées (Figure 2.8, page 60), à une ou deux exceptions près, le revers de la médaille était le nombre très important d'informations à analyser. Si l'on tient compte des différents angles d'émission pour les particules et des différents isotopes pour les résidus on aboutit à un nombre de figures de l'ordre de 10000 ! Si chaque participant s'est concentré sur ses propres résultats, l'analyse globale des résultats fut faite par trois personnes, chacune se concentrant sur un type d'observable. Ainsi R. Michel (ZSR -Hanovre) s'occupa des résidus, F. Gallmeier (ORNL - Oak Ridge) des particules légères chargées et moi-même des neutrons. Je donne ci-après un résumé des trois analyses globales, en détaillant plus le cas des neutrons pour entrer dans les détails de l'exercice.

#### Analyse - résidus

Il y a deux types d'observables concernant les résidus : les distributions (isotopiques, en masses et en charges) et les fonctions d'excitation.

Pour les distributions R. Michel a utilisé un système de notation explicité dans le tableau 2.1 et a considéré différents domaines en masse (voir tableau 2.2) pouvant éventuellement être reliés à des mécanismes particuliers de production.

2 points	bon
1 point	modérément bon, avec des problèmes mineurs
-1 point	modérément mauvais, avec des problèmes particuliers
-2 points	très mauvais, systématiquement faux

TABLE 2.1 – Système de notation proposé par R. Michel pour caractériser globalement les modèles.

- |   |
|---|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>- noyaux proche en masse et/ou charge du projectile (ici le noyau lourd !)</li> <li>- noyaux dont la masse est supérieure à la moitié de celle du projectile</li> <li>- noyaux légers dont la masse est bien plus petite que la moitié de celle du projectile</li> <li>- produits de fission (pour le plomb et l'uranium)</li> <li>- noyaux de masse <math>A \leq 10</math></li> </ul> |
|---|

TABLE 2.2 – Découpage en différents domaines en masses, caractéristiques de mécanisme de production.

La figure 2.10 donne une vue générale des distributions en masses de tous les

Proj.	Targ.	Enerpi. [MeV]	Exp. author	all models	cem03-02	cem03-03	cascade-04	phits-jam	phits-bertini	phits-liquid	isabel- emm	isabel- gemin	gem4- bertini	gem4- binary	cascade- asf	inc4.5- abla07	inc4.5- srm	isabel- abla07	inc4.5- gemin++	cascade- x	mcnp-x- bert
n	Fe	65	hjoft	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Fe	800	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Fe	800	amian	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Fe	1200	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Fe	1600	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Fe	3000	ishibashi	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb208	63	guertin	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	256	meier	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	800	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	800	amian	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	1200	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	1600	leray	[Fig.] [data] [FoM]																	
p	Pb	3000	ishibashi	[Fig.] [data] [FoM]																	

FIGURE 2.9 – Exemple de tableau du site web AIEA (*Benchmark of Spallation Models*) permettant d'accéder aux résultats de tous les participants. Le tableau ici est celui relatif aux sections efficaces doublement différentielles de production de neutrons. Le lien [Fig.] permet d'accéder aux figures comparant calcul et données expérimentales, le lien [data] au fichier ASCII des résultats de calcul et le lien [FoM] aux figures des FoM.

modèles sur les cinq réactions considérées. Les distributions en charge sont similaires. Il est évident que ce genre de figures ne peut que donner des idées globales, comme la dispersion ou le consensus des modèles dans un domaine ou l'aptitude des modèles à reproduire ou non les données expérimentales. Une étude de chaque modèle pris séparément basée sur le système de notation du tableau 2.1 et appliquée aux distributions en masses et en charges dans les différents domaines du tableau 2.2 a abouti aux résultats illustrés sur la figure 2.11. Un modèle absolument parfait aurait obtenu 50 points et un absolument mauvais -50 points.

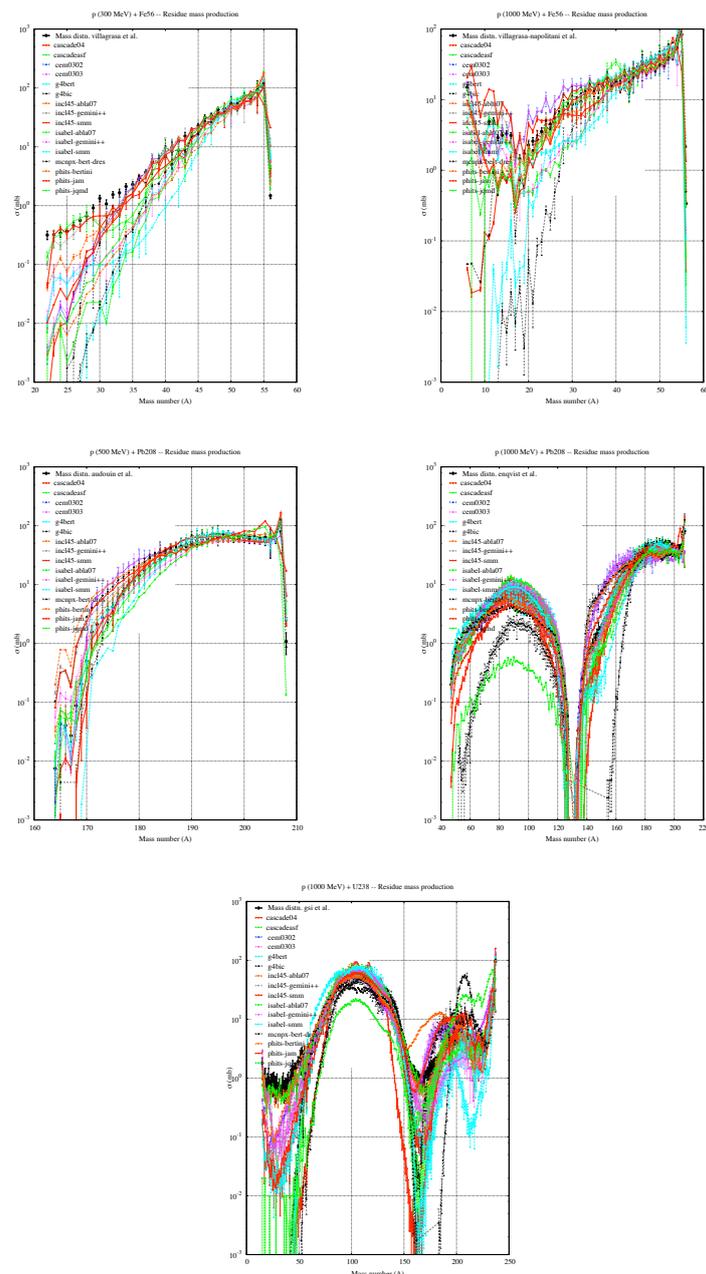


FIGURE 2.10 – Distributions en masses obtenues par les modèles. En haut avec le fer (gauche : 300.A MeV; droite : 1000.A MeV). Au milieu avec le plomb (gauche : 500.A MeV; droite : 1000.A MeV). En bas avec l'uranium à 1000.A MeV.

Une première conclusion sur les résidus est qu'aucun modèle ne reproduit l'ensemble des données. Les principaux problèmes rencontrés sont :

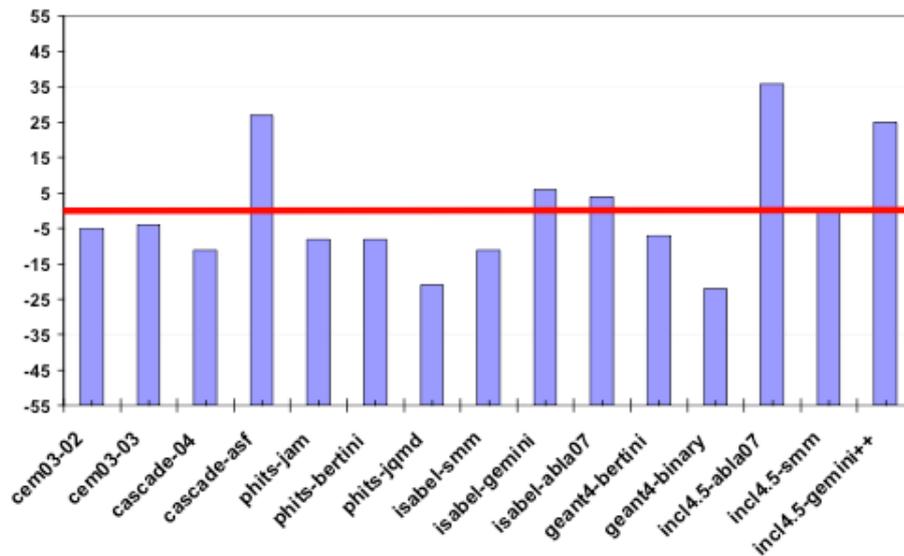


FIGURE 2.11 – Notes obtenues par les modèles pour les distributions en masses et en charges mesurées en cinématiques inverses avec du fer (300 et 1000.A MeV), du plomb (500 et 1000.A MeV) et de l'uranium (1000.A MeV)

- les noyaux légers, difficiles à reproduire et ce d'autant plus que leur masse est petite,
- les produits de fission, très différemment reproduits (certains modèles doivent revoir leur mécanisme de fission),
- le cas de l'uranium, où la compétition fission/évaporation pose problème, sans doute du fait d'une fission importante,
- la production des noyaux de masses bien différentes du noyau lourd projectile (cinématique inverse !), mais ne venant pas de la fission.

Il est à noter toutefois que six modèles ont la moyenne et que trois sortent du lot en donnant globalement des résultats corrects. Le rôle du modèle de désexcitation est très important dans la production des résidus, comme le montre les différentes combinaisons de codes de cascade intra-nucléaire avec des codes de désexcitation.

Les distributions isotopiques sont plus difficiles à reproduire que les distributions en masses et charges, puisque ces dernières sont intégrées en charge ou masse, ce qui peut permettre des compensations de sur- et sous-estimation. La figure 2.12 donne les notes obtenues par les modèles. Ici un modèle absolument parfait aurait obtenu 28 points et un absolument mauvais -28 points. Cette figure de notations montre clairement la difficulté de l'ensemble des modèles à reproduire les distributions isotopiques. Seuls deux obtiennent la moyenne et un seul sort du lot. Certains codes sont très nettement moins bons que dans les cas des distributions en masses et charges, ce qui prouve la notion de compensation et la limite des observables intégrées.

Les principales remarques sur les distributions isotopiques portent sur :

- les difficultés assez générales à reproduire les produits de fission,
- la compétition fission/évaporation qui ne semble pas toujours maîtrisée,
- les noyaux de masse nettement plus petite que le projectile lourd (cinématique inverse !), mais supérieure aux produits de fission, et

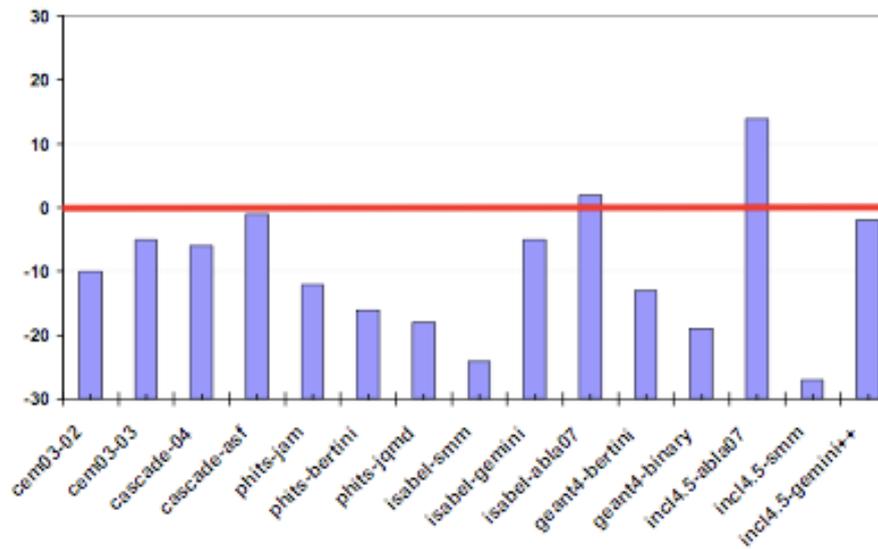


FIGURE 2.12 – Notes obtenues par les modèles pour les distributions isotopiques mesurées en cinématiques inverses avec du fer (300 et 1000.A MeV), du plomb (500 et 1000.A MeV) et de l'uranium (1000.A MeV).

- des conclusions différentes suivant les énergies incidentes, comme la dispersion des résultats de modèles (voir fig. 2.13)

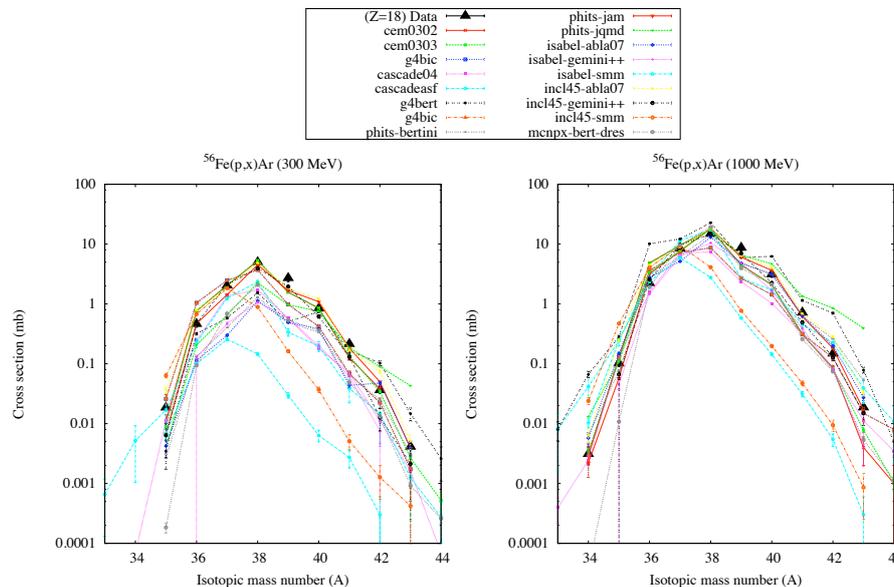


FIGURE 2.13 – Distributions en masses de l'isotope Argon dans les réactions  $Fe+p$  à 300.A MeV (gauche) et 1000.A MeV (droite) par tous les modèles.

Le dernier point illustré par la figure 2.13 montre l'importance de l'énergie incidente dans la faculté des modèles à reproduire les données expérimentales. Les fonctions d'excitation sont justement les observables qui permettent de juger de la qualité des modèles en fonction de l'énergie incidente. Si les distributions isotopiques sont plus fines que les distributions en masses et charges, les fonctions d'excitations sont un cran au-dessus encore dans la difficulté, car c'est la variation de la section efficace de production d'un isotope donné en fonction de l'énergie incidente.

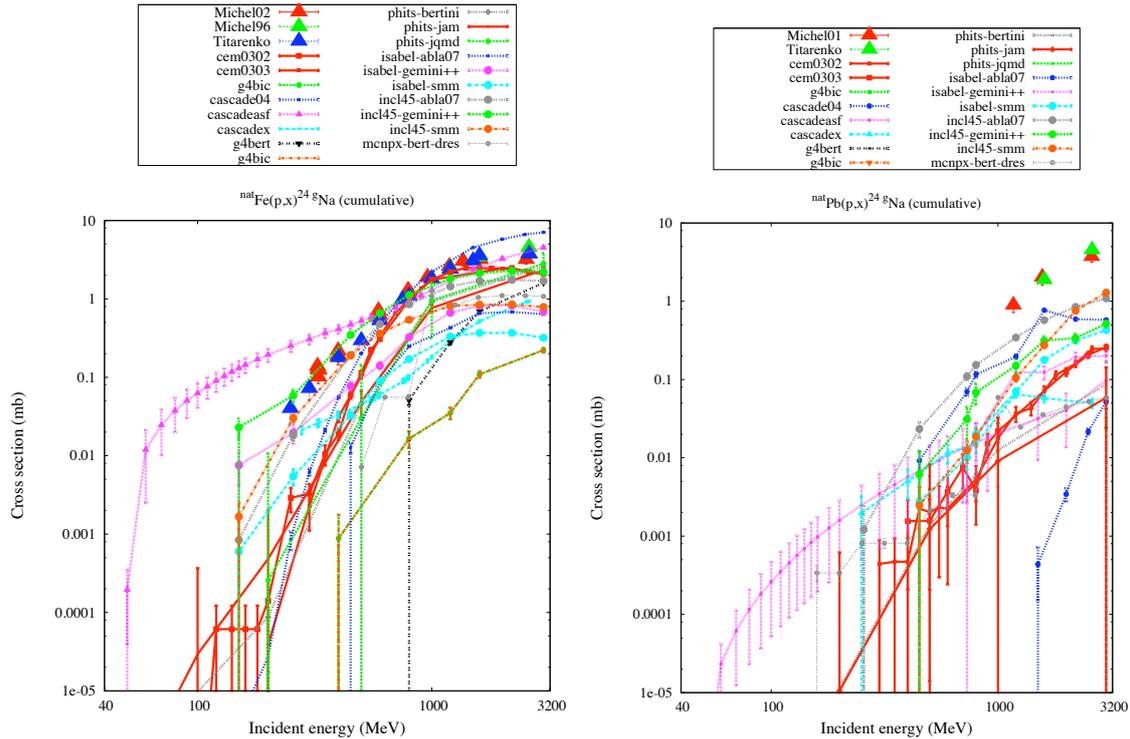


FIGURE 2.14 – Fonctions d'excitation du  $^{24}\text{Na}$  pour les réactions  $p+\text{Fe}$  (gauche) et  $p+\text{Pb}$  (droite).

Pour l'analyse des fonctions d'excitation la méthode employée a dû prendre en compte le nombre très important de figures et les comportements très différents des modèles. Aussi R. Michel s'est concentré sur des isotopes particuliers pour une fois encore caractériser des domaines ou mécanismes caractéristiques et dont voici la liste :

- $^4\text{He}$ ,  $^7\text{Be}$  et  $^{10}\text{Be}$  pour les noyaux très légers de  $A \leq 10$ ,
- $^{22}\text{Na}$ ,  $^{24}\text{Na}$ ,  $^{46}\text{Sc}$  et  $^{48}\text{V}$  pour les noyaux légers,
- $^{54}\text{Mn}$  et  $^{56}\text{Co}$  comme autres noyaux légers pour le plomb et noyaux proches de la cible pour le Fer,

et dans le cas uniquement du plomb,

- $^{75}\text{Se}$  comme autre noyau léger de fission,
- $^{88}\text{Zr}$  et  $^{95}\text{Zr}$  comme produits de fission, pour montrer la différence entre riche et pauvre en neutron,
- $^{127}\text{Xe}$  et  $^{128}\text{Xe}$  comme produits de fission pouvant aussi venir d'autres mécanismes,
- $^{149}\text{Gd}$ ,  $^{175}\text{Hf}$  et  $^{188}\text{Pt}$  comme noyaux d'évaporation et enfin
- $^{200}\text{Pb}$  et  $^{204}\text{Bi}$  comme noyaux proches de la cible.

Il est à rappeler que les cibles considérées pour ces fonctions d'excitation (ici cinématique directe !) sont le fer et le plomb (voir Tableau 2.7, page 59). Les conclusions générales sont pour les noyaux ( $A \leq 10$ ) que les résultats se sont bien améliorés depuis le précédent *benchmark* (Michel et Nagel 1997), même si tous les modèles peuvent encore faire mieux et si certains ont de grosses lacunes ; pour les noyaux légers, prenant pour exemple le  $^{24}\text{Na}$ , on peut voir sur la figure 2.14

à la fois la dispersion des résultats, assez caractéristique encore aujourd'hui des différences entre les modèles, et la dépendance de la cible considérée, indice de mécanismes de production différents ; pour la fission on retrouve les différences entre les modèles qui gèrent raisonnablement bien cette voie et les autres, et l'on peut noter que, d'une part, les produits de fission riches en neutron sont moins bien reproduits que les pauvres en neutron, symptomatique entre autre de lacunes des modèles de spallation aux basses énergies incidentes (seuil), et d'autre part, certains modèles mettent bien en jeu les différents mécanismes de production des noyaux comme les Xe suivant l'énergie incidente, même si c'est un domaine où des progrès sont à faire par de très nombreux modèles ; pour les noyaux venant de l'évaporation du plomb si certains modèles donnent de très corrects résultats, d'autres ont parfois presque un ordre de grandeur sur toute la gamme et ce d'autant plus que le noyau est léger ; enfin, les noyaux proches de la masse de la cible sont en général assez bien reproduits, sauf si l'on considère les noyaux de charge plus élevée que la cible où là des progrès restent à faire pour la plupart.

Le manque de calculs fins aux basses énergies ne permet pas toujours des analyses précises. On verra dans le chapitre 3 (section 3.1.2) qu'un découpage fin en énergie incidente permet de mieux statuer sur la qualité d'un modèle.

#### Analyse - particules chargées légères

Les particules chargées légères considérées ici sont au nombre de cinq : proton, deuton, triton,  $^3\text{He}$  et  $\alpha$ . F. Gallmeier qui en a fait l'analyse globale a aussi utilisé un système de notation, quoique un peu différent de celui de R. Michel pour les résidus. Ce système est donné dans le tableau 2.3. Ainsi, par exemple, lorsque les résultats de calcul dévient de plus ou moins un facteur 2 ( $x=2$ ) des données expérimentales, le modèle gagne 3 points. Lorsqu'un modèle n'est pas capable de produire de résultat pour une observable, comme le cas de certains modèles qui ne peuvent émettre de particules composites, alors il reçoit 0 point.

Gamme d'accord [valeur/x ; valeur*x]	points
x=5	1
x=3	2
x=2	3
x=1.4	4

TABLE 2.3 – *Système de notation proposé par F. Gallmeier pour caractériser globalement les modèles.*

Ce système a été appliqué à chaque réaction pour toutes les particules émises et la figures 2.15 donnent deux exemples de résultats. De cette figure l'on peut tirer les principales conclusions sur l'émission des particules chargées légères. Si certains modèles semblent globalement être plus performants que d'autres, les résultats dépendent beaucoup de la réaction et des particules émises considérées. Ainsi pour la réaction  $n(542 \text{ MeV})+\text{Bi}$  les protons sont reproduits raisonnablement par de très nombreux modèles, ce qui n'est plus le cas à plus haute énergie,  $p(2500 \text{ MeV})+\text{Au}$ . Même si le spectre couvert n'est pas exactement le même, les données à 542 MeV ne couvrant pas la basse énergie (évaporation), il est clair que l'énergie incidente joue un rôle. Les cas des particules composites (d, t,  $^3\text{He}$  et  $\alpha$ ) divisent nettement les modèles. Il y a ceux qui les émettent tout le long de la réaction de

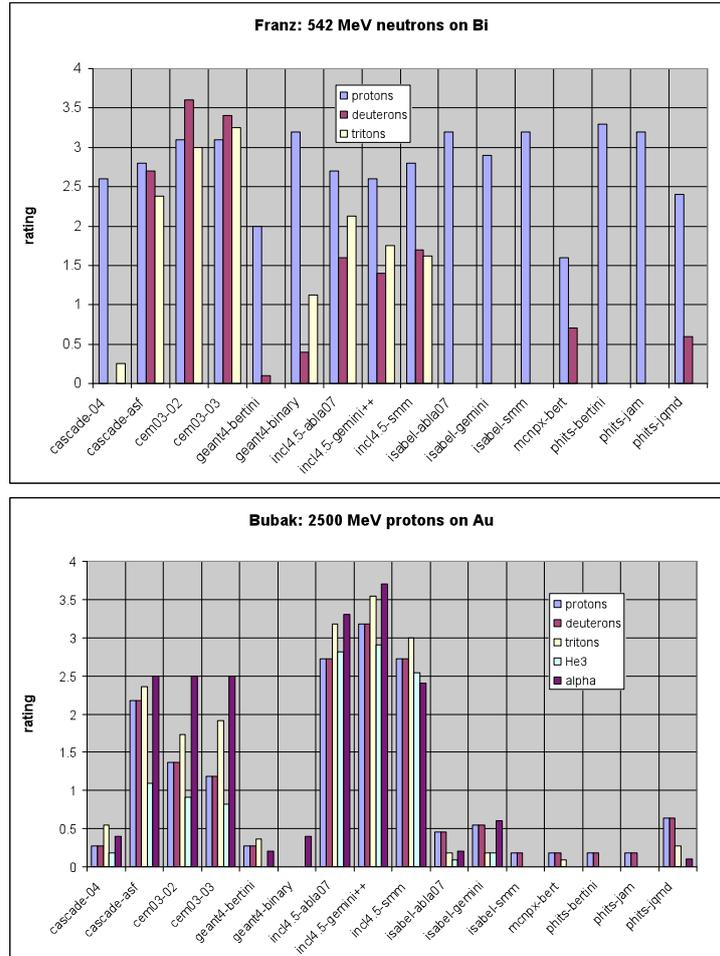


FIGURE 2.15 – Notes obtenues par les modèles pour les spectres doublement différentiels de protons, deutons et tritons dans la réaction  $n(542 \text{ MeV}) + \text{Bi}$  (en haut) et les spectres doublement différentiels de protons, deutons, tritons,  $^3\text{He}$  et  $\alpha$  dans la réaction  $p(2500 \text{ MeV}) + \text{Au}$  (en bas).

spallation et ceux qui n'ont pas de mécanisme approprié pour l'émission à haute énergie (cascade intra-nucléaire). Ce point a été abordé dans le chapitre 1 (section 1.1.3, page 9). En ce qui concerne à la fois la dispersion des résultats de calcul des modèles et l'aptitudes de ces derniers à reproduire les données, la figure 2.16 donne les deux cas extrêmes rencontrés lors de ce *benchmark*. Le cas de l'émission d' $^3\text{He}$  dans la réaction  $p(62 \text{ MeV}) + ^{56}\text{Fe}$  cumule les difficultés d'une particule composites et d'une énergie incidente sous le seuil des hypothèses des réactions de spallation (section 1.1.1, page 4).

Les trois principaux enseignements de cette analyse sont :

- la nécessité d'un mécanisme approprié pour reproduire les particules composites de hautes énergies,
- la difficulté à reproduire le pic haute énergie aux angles avant, et
- la difficulté à reproduire correctement la partie énergétique entre la fin de la cascade intra-nucléaire et la désexcitation, là où certains utilisent pourtant un modèle de *pré-équilibre* entre les deux phases.

De plus, si d'une manière générale, tous modèles et réactions confondus, les spectres doublement différentiels calculés de protons reproduisent les données à

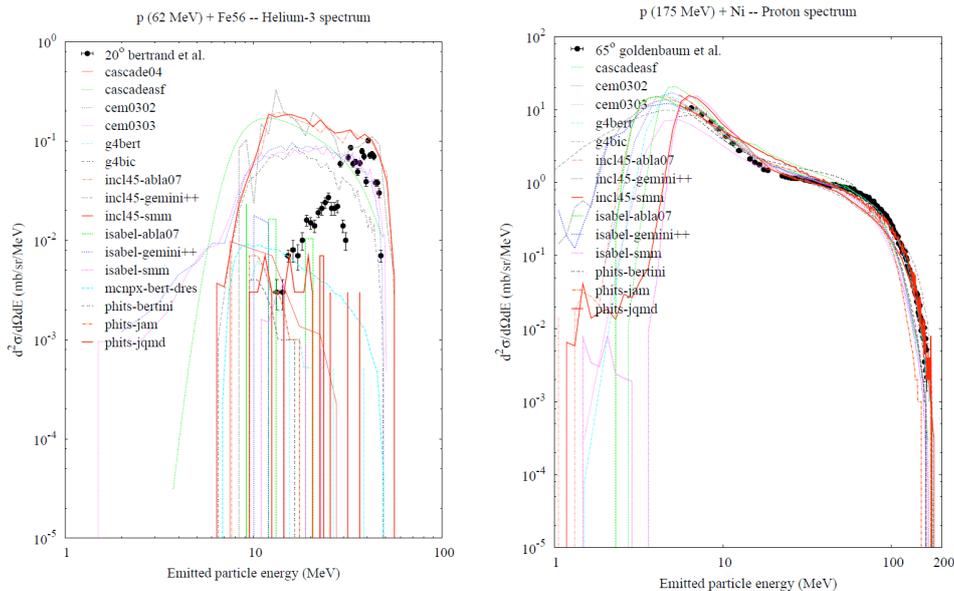


FIGURE 2.16 – Les meilleurs et pires résultats obtenus globalement par les modèles pour l'émission de particules légères chargées. A gauche, le pire cas avec les spectres doublement différentiels  $d^3\text{He}$  dans la réaction  $p (62 \text{ MeV}) + {}^{56}\text{Fe}$ , et à droite le meilleur cas avec les spectres doublement différentiels de proton dans la réaction  $p (175 \text{ MeV}) + \text{Ni}$ .

plus ou moins un facteur 2-3, pour les autres particules c'est à plus ou moins un facteur 4, voire 5. Certes il existe des différences entre les modèles, mais ce résultat montre le chemin qu'il reste à faire concernant la simulation d'émission de particules légères chargées dans les réactions de spallation. Pour donner un ordre d'idée, les neutrons sont eux reproduits à plus ou moins 30%. Le cas de ces derniers est traité ci-après.

Dans les particules chargées on pourrait aussi inclure les pions. Cependant, ils procèdent de mécanisme de production bien différents et leurs sections efficaces de productions sont plus faibles. Leur analyse globale n'a pas été entreprise, principalement pour des questions de temps, mais, prenant la figure 2.17 pour exemple, nous pouvons tirer les conclusions suivantes :

- les faibles sections efficaces nécessitent de lancer un nombre de projectiles plus important pour avoir une statistique correcte et donc un temps de calcul plus long,
- si pour les pions de hautes énergies les modèles donnent des résultats assez comparables, la structure aux angles avant n'est là aussi pas toujours très bien reproduite, et
- de fortes différences apparaissent entre les modèles plus l'énergie du pion décroît.

### Analyse - neutrons

Les observables concernant les neutrons sont les spectres doublement différentiels surtout, mais aussi les multiplicités et distributions de multiplicités. C'est dans cet ordre que ci-dessous elles sont abordées, même si les spectres sont beaucoup plus détaillés.

J'ai repris le système de notation de R. Michel (tableau 2.1) pour étudier globalement l'ensemble des modèles. De manière à séparer les différents mécanismes,

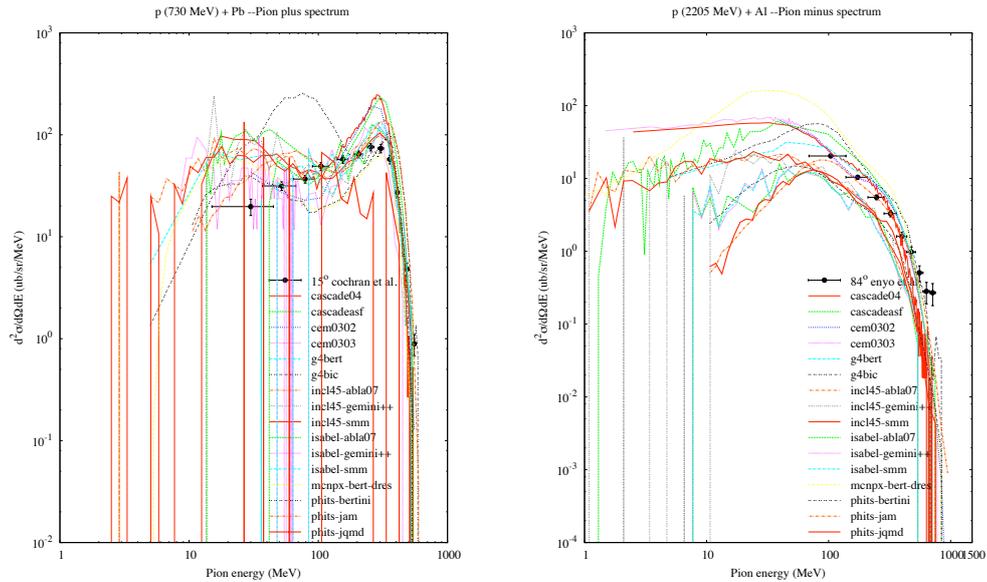


FIGURE 2.17 – Spectres doublement différentiels de pions. A gauche, production de  $\pi^+$  à  $15^\circ$  dans la réaction  $p(730\text{MeV})+\text{Pb}$  et, à droite, production de  $\pi^-$  à  $84^\circ$  dans la réaction  $p(2205\text{MeV})+\text{Al}$ .

chaque spectre a été découpé en énergie (0-20 MeV pour la désexcitation ; 20-150 MeV pour la phase intermédiaire parfois appelée *pré-équilibre* ; supérieure à 150 MeV pour la phase de cascade intra-nucléaire) et en angle (angles avant ( $\leq 45^\circ$ ) ; angles transverses ( $45^\circ \leq \theta \leq 135^\circ$ ) ; angles arrières ( $\geq 135^\circ$ )). La figure 2.18 donne le résultat des notes moyennées sur ces différentes régions et sur toutes les réactions étudiées. L'on voit clairement que, contrairement aux résidus et aux particules chargées, la dispersion entre les modèles est beaucoup moins importante et l'ensemble des résultats est correct. Cependant, une étude plus précise des spectres permet de pointer des déficiences et des différences.

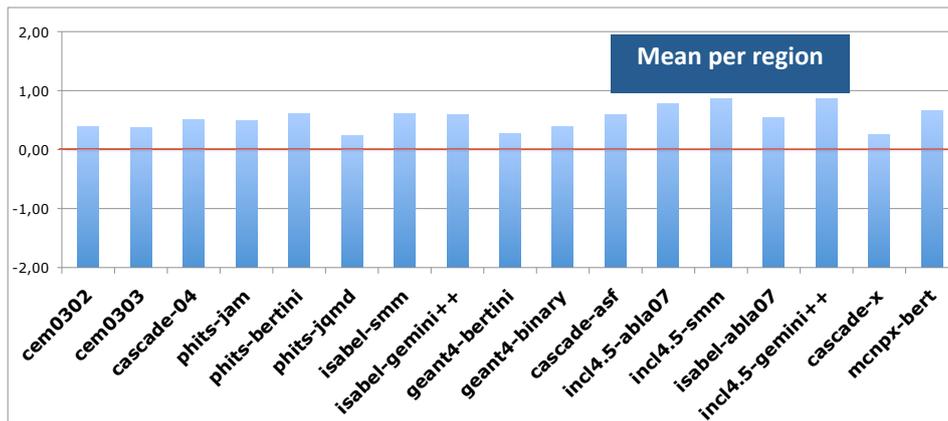


FIGURE 2.18 – Notes moyennes obtenues par les modèles pour les spectres doublement différentiels de production de neutrons. Le système de notation est le même que celui précisé par R. Michel (page 62, tableau 2.1)

Dans la partie basse énergie les modèles donnent de bons résultats. Ceci vient du fait que l'évaporation de neutrons est la voie privilégiée de la désexcitation et que le formalisme de l'évaporation est bien connu. On peut néanmoins remarquer deux choses. D'une part la frontière entre la phase rapide et la désexcitation est difficile à situer très précisément et ainsi sur la figure 2.19 l'on voit que vers 20

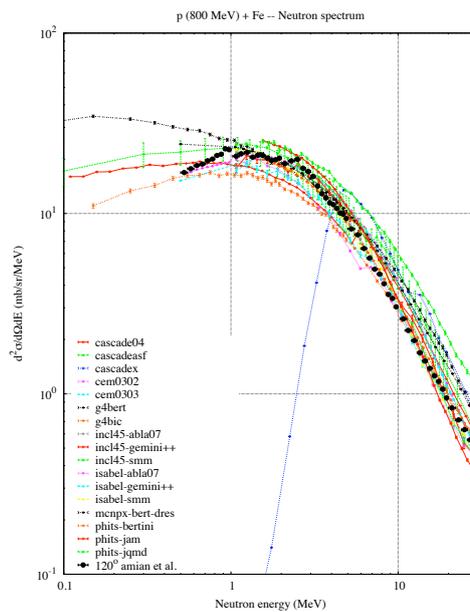


FIGURE 2.19 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à  $120^\circ$  dans la réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie basse énergie.

MeV des différences apparaissent plus marquées, et d'autre part, de l'autre côté du spectre vers les très basses énergies, les modèles peuvent beaucoup diverger. Ce dernier point est possiblement relié à la section efficace de capture de neutron utilisée dans les modèles d'évaporation (sujet abordée dans la section 1.2.2, page 22). Les valeurs utilisées pour ces sections reposent sur des mesures expérimentales faites évidemment avec des noyaux froids, or ici les noyaux sont chauds, les niveaux d'énergies différents donc et les probabilités de capture de neutrons de basses énergies modifiées.

La partie du spectre comprise entre 20 et 150 MeV est liée à la fin de la cascade intra-nucléaire. Certains modèles incorporent d'ailleurs une étape intermédiaire entre la cascade et la désexcitation, la phase de *pré-équilibre*, considérant que le noyau issu de la cascade n'a pas toutes les caractéristiques d'un noyau composé. La figure 2.20 montre nettement en dessous de 100 MeV deux groupes de modèles. À deux exceptions près qui sont le modèle CASCADEX et le modèle JQMD du code de transport PHITS, ces deux groupes sont caractérisés par le fait d'avoir ou non une phase de *pré-équilibre*. Une façon de mettre en lumière l'utilité ou non d'un modèle de *pré-équilibre* est de regarder par exemple le spectre de neutrons dans la réaction  $p(63\text{MeV})+\text{Pb}$ , où l'énergie incidente est telle que les modèles avec une phase de *pré-équilibre* devrait donner de meilleurs résultats. Sur la partie haute de la figure 2.21 sont montrés les résultats pour trois angles des modèles avec *pré-équilibre* et sur la partie basse les modèles sans *pré-équilibre*. Si les modèles avec *pré-équilibre* sont moins dispersés et donnent pour l'angle arrière de meilleurs résultats que les modèles sans *pré-équilibre*, ces derniers sont globalement meilleurs à l'angle avant. La situation est plus compliquée pour l'angle transverse. La dispersion des résultats pour les modèles sans *pré-équilibre* est à mettre sur le compte du traitement particuliers de cette gamme en énergie incidente en dehors du domaine de la spallation. D'ailleurs un modèle sans *pré-équilibre*, INCL4.5, donne des résultats intéressants, si l'on fait abstraction des basses énergies, i.e. vers 10 MeV. Ce

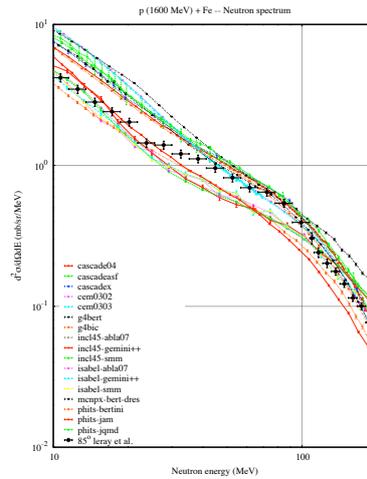


FIGURE 2.20 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à 85° dans la réaction  $p(1600\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie énergie intermédiaire (20-150 MeV).

défaut dans INCL4.5 a été par la suite corrigé dans INCL4.6 et les résultats sur ce genre d'observable sont devenus très corrects. De tout ceci il ressort que cette gamme en énergie du spectre pose encore de petits soucis, mais que les résultats sont assez satisfaisants, que l'on utilise ou non une phase intermédiaire. L'utilité d'un modèle de *pré-équilibre* n'ayant pas pu être prouvé lors de ce *benchmark*.

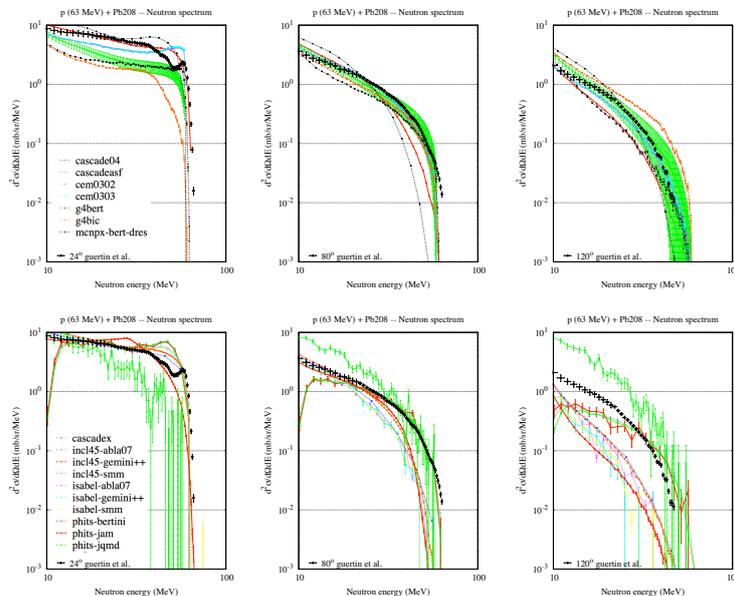


FIGURE 2.21 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles (24° à gauche, 80° au centre et 120° à droite) dans la réaction  $p(63\text{MeV})+\text{Pb}$ . Les figures du haut concernent les modèles incorporant une phase de pré-équilibre et les figures du bas les modèles n'incorporant pas une phase de pré-équilibre.

La partie haute énergie du spectre est très anisotropique, aussi une séparation en angles avant ( $\leq 45^\circ$ ), angles transverses ( $45^\circ \leq \theta \leq 135^\circ$ ) et angles arrières ( $\geq 135^\circ$ ) est nécessaire.

Les angles avant sont caractérisés par deux pics qui disparaissent au fur et à mesure que l'angle s'ouvre (Fig. 2.22). Le pic quasi-élastique se situe aux énergies proches de celle du projectile incident, il est la conséquence de l'interaction

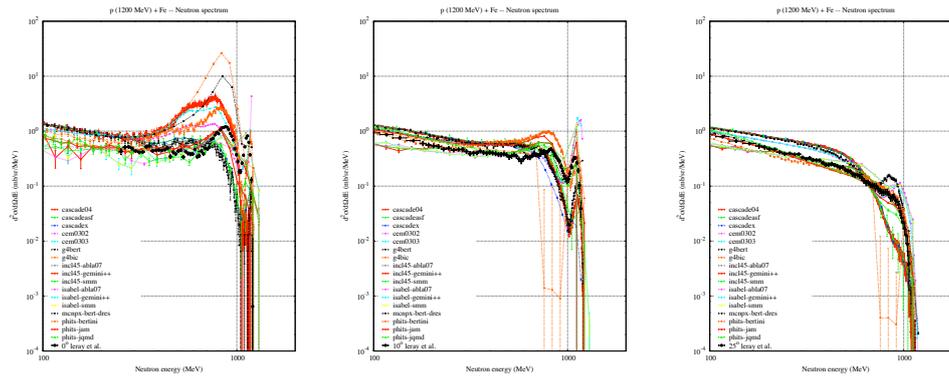


FIGURE 2.22 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles avant ( $0^\circ$  à gauche,  $10^\circ$  au centre et  $25^\circ$  à droite) dans la réaction  $p(1200\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ).

directe de ce projectile avec un neutron du noyau et de ce fait est sensible aux sections efficaces nucléon-nucléon utilisées ainsi qu'à la distribution des nucléons dans le noyau. Si la position du pic est souvent correcte, sa hauteur pose problème pour beaucoup de modèles. Le pic quasi-inélastique est lui situé à des énergies un peu en-dessous du pic quasi-élastique et est nettement plus large. Ce pic est dû à la décroissance de la résonance  $\Delta(1232)$ . La modélisation de cette résonance est assez différente d'un modèle à l'autre et le pic n'est pas toujours facile à reproduire à tous les angles. À  $25^\circ$  certains modèles exhibent encore un pic là où les données expérimentales n'en montrent pas et à  $0^\circ$  des différences d'un ordre de grandeur peuvent exister sur sa hauteur entre modèles et mesures. Il est toutefois à noter que le cas  $0^\circ$  est délicat à simuler, puisqu'il faut trouver l'optimum entre l'ouverture angulaire expérimentale et le temps de calcul.

Les angles transverses sont la partie du spectre haute énergie la mieux reproduites par l'ensemble des modèles. La figure 2.23, une distribution angulaire du facteur de déviation (ou  $FoM$ )  $M$  décrit page 87, montre clairement ce point pour deux réactions,  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$  et  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ . Plus ce facteur est proche de zéro plus le modèle est proche des données en valeur et en forme de distribution. On retrouve une plus grande difficulté à reproduire les angles avant et l'on voit que les angles arrières sont eux aussi plus compliqués à obtenir correctement.

Deux exemples de spectres de neutrons de hautes énergies émis à l'arrière sont donnés sur la figure 2.24. Si la forme de la distribution est assez bien reproduite à  $150^\circ$  pour la réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ , les modèles diffèrent par les valeurs de sections efficaces. Les difficultés s'accroissent avec l'angle, comme le montre le spectre à  $160^\circ$  pour la réaction  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ . Les particules émises à haute énergie sont focalisées vers l'avant et celles qui s'échappent vers l'arrière ont moins d'énergie, étant le résultat de nombreuses interactions entre nucléons du noyau. Ainsi ces angles sondent la bonne prise en compte de la diffusion multiple.

En conclusion sur les spectres de neutrons, on peut dire que les modèles donnent des résultats satisfaisant dans l'ensemble. Les points principaux à améliorer ou qui sont diversement reproduits sont :

- les pics quasi-élastiques et quasi-inélastiques,
- les neutrons de très basses énergies (mais des données expérimentales manquent aussi), et
- les angles très piqués à l'arrière.

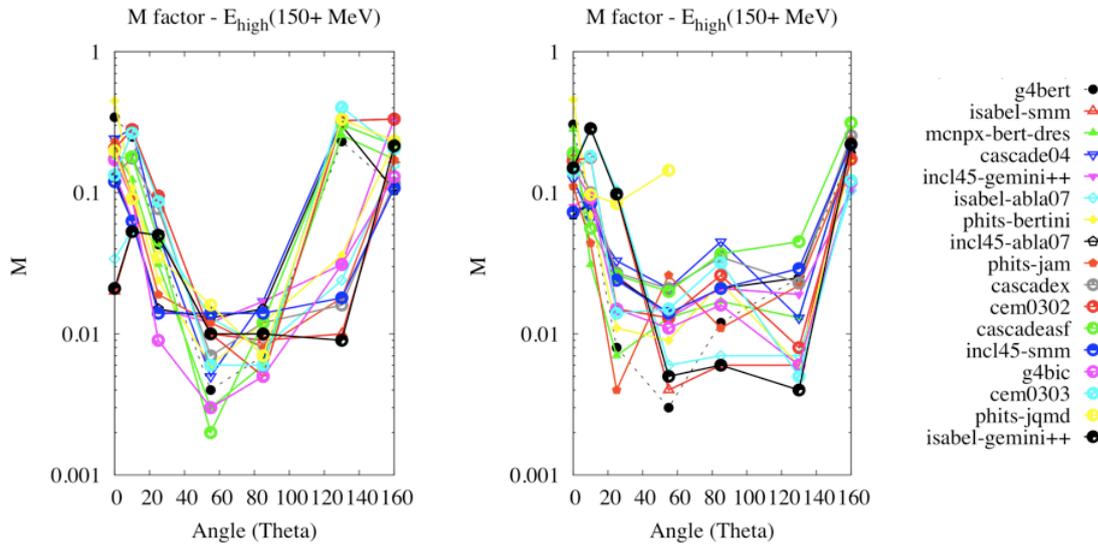


FIGURE 2.23 – Distributions angulaires du facteur de déviation (ou FoM)  $M$  (décrit page 87) pour les réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$  et  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ).

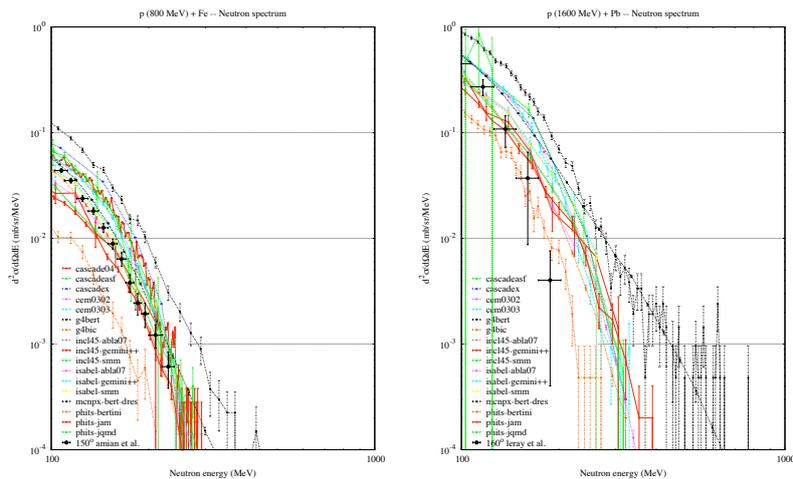


FIGURE 2.24 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons aux angles arrières. À  $150^\circ$  dans la réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$  (à gauche) et  $160^\circ$  dans la réaction  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$  (à droite). Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ ).

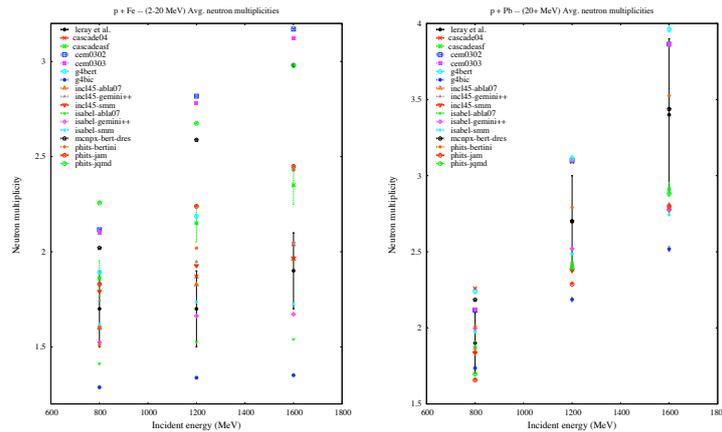


FIGURE 2.25 – Multiplicités moyennes de neutrons. À gauche, pour des neutrons de basses énergies (entre 2 et 20 MeV) dans les réactions  $p(800 \text{ MeV})+\text{Fe}$ ,  $p(1200 \text{ MeV})+\text{Fe}$  et  $p(1600 \text{ MeV})+\text{Fe}$  et, à droite, pour des neutrons de hautes énergies ( $\geq 20 \text{ MeV}$ ) dans les réactions  $p(800 \text{ MeV})+\text{Pb}$ ,  $p(1200 \text{ MeV})+\text{Pb}$  et  $p(1600 \text{ MeV})+\text{Pb}$ .

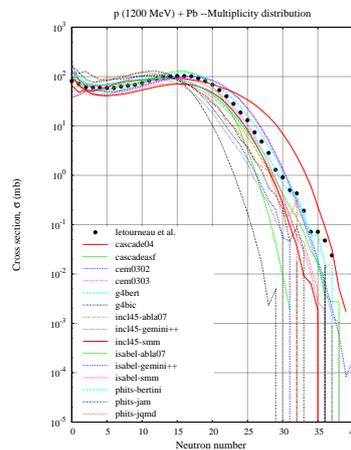


FIGURE 2.26 – Distribution de multiplicités de neutrons dans la réaction  $p(1200 \text{ MeV})+\text{Pb}$ .

Les deux autres observables concernant les neutrons sont les multiplicités moyennes et les distributions de multiplicités. Beaucoup moins de données existent du fait notamment que ce sont des données intégrées. On retrouve des conclusions déjà tirées avec les spectres, comme la bonne qualité globale et une dispersion en général réduite. Ainsi la figure 2.25 montre six multiplicités moyennes, trois pour les neutrons de basses énergies avec une cible de fer et trois pour les neutrons de hautes énergies avec une cible de plomb. Les trois cas sont trois énergies incidentes différentes. Si dans le cas du fer les résultats de calculs sont au pire dans un facteur 2, beaucoup de modèles approchant les données à 30% ou mieux, dans le cas du plomb la quasi totalité des points sont dans les barres d'erreurs ou très proches. En ce qui concerne les distributions de multiplicités les principales remarques sont une surestimation des basses multiplicités et une sous-estimation des hautes, et ce d'une manière presque générale. La figure 2.26 avec pour cible du plomb en donne un exemple. Dans le cas du fer (non montré ici) pour la même énergie incidente la chute est plus forte à haute multiplicité. Les très faibles multiplicités de neutrons sont liées aux neutrons très énergétiques qui sont assez bien reproduits, mais plutôt surestimés, et le cas de multiplicité zéro est relié à l'émission d'un seul pro-

ton (pic quasi-élastique du proton). Les très hautes multiplicités sont reliées à de nombreuses évaporations de neutrons et, donc, à la fois intègrent une quantité de chemins, de voies possibles, ce qui explique la dispersion des modèles, et concerne de plus en plus faibles sections efficaces, ce qui explique la difficulté à reproduire les données expérimentales.

### 2.2.3 Conclusions

Ce *benchmark* a été instructif à plus d'un titre. Il a permis de faire un état des lieux des modèles de spallation, de savoir ce que l'on peut en attendre comme résultats, de connaître les points de consensus et de divergence entre eux, de faire ressortir, pour une observable donnée, le ou les modèles les plus appropriés, et de pointer les qualités et défauts de tous en général et de chacun en particuliers. Tous ces points ont été abordés dans la section précédente, excepté le tout dernier pour éviter une surcharge dans ce mémoire. Néanmoins sont données en annexe A.3 des conclusions de certains participants sur leur modèle lors du workshop de Saclay (2010), à titre d'exemple.

Aucun modèle ou combinaison de modèles n'est pour l'instant capable d'être meilleur que tous les autres sur l'ensemble des observables. Ceci explique en bonne partie la raison de tant de modèles différents. Ce sont d'ailleurs ces différences qui peuvent nous permettre de mieux cerner, de mieux appréhender les mécanismes, les formalismes, les ingrédients qui doivent être pris en compte pour la modélisation des réactions de spallation et cela grâce aux résultats d'un tel *benchmark*. Pour exemples il a été discuté dans la section précédente les sujets du *pré-équilibre* et de l'émission de particules légères chargées composites de hautes énergies. Il en est ressorti que l'utilité d'une phase intermédiaire entre cascade et désexcitation ne semblait pas d'une absolue nécessité, dans le premier cas, mais qu'un modèle de type coalescence était nécessaire au sein de la cascade pour reproduire correctement les spectres sur toute la gamme en énergie dans le second cas. D'autres sujets non abordés ici ont aussi été étudiés, comme l'apport du formalisme de Hauser-Feshbach sur celui de Weisskopf, qui n'est pas apparu crucial lors de ce *benchmark*, ou encore les promesses d'un modèle de physique plus *fondamentale* pour la phase rapide, à savoir QMD, qui malheureusement souffre par un temps de calcul trop lent pour être compétitif dans le cas des nucléons incidents et dont l'émission de particules composites n'a pas tiré les avantages attendus (voir conclusions de PHITS, annexe A.3).

il y a aussi les mécanismes qui nécessitent des observables particulières pour être justifiés ou mis en défaut avec assurance. Ainsi la multifragmentation ne semble pas assurément nécessaire à la vue des données expérimentales utilisées ici, la production de noyaux de masses intermédiaires pouvant apparemment être reproduite plus ou moins correctement avec un mécanisme d'évaporation ou de cassure binaire. Cependant son utilité pourrait être plus évidente à des énergies incidentes plus importantes.

La question du choix des données expérimentales est toujours aussi importante, car ce choix fixe l'espace où les modèles sont sondés. Ainsi, pour ne citer que quelques exemples, des fonctions d'excitation obtenues avec des neutrons incidents seraient très intéressantes à comparer à celles obtenues avec les protons<sup>2</sup>, l'étude des spectres doublement différentiels de production de Lithium, Beryllium,

2. Si des données commencent à apparaître elles sont encore bien restreintes (I. Leya et R. Michel, NIM B269, 2847 (2011)).

etc., pour aller au-delà de l' $\alpha$ , permettrait d'aller plus en profondeur dans l'étude de la production des petits noyaux ( $A \leq 10$ )<sup>3</sup>, et aussi l'étude des réactions de spallation avec des composites incidents serait intéressante et nécessaire pour les modèles implantés dans les codes de transport<sup>4</sup>.

Enfin, cet exercice a aussi été instructif par sa logistique, cherchant l'optimum entre désirs et contraintes. Vouloir faire l'état des lieux des modèles de spallation nécessite la participation de tous ou du plus grand nombre de modèles ou combinaisons de modèles et des calculs et comparaisons sur de nombreuses données expérimentales, ce qui aboutit à une quantité d'information considérable à analyser<sup>5</sup>. Par conséquent il faut en amont faire des choix pour ne pas effrayer les participants et avoir la contribution du plus grand nombre, et pouvoir être capable de faire la meilleure analyse sans se noyer sous la masse d'information obtenue. Il faut donc dès le départ savoir ce que l'on veut en ressortir tout en gardant un spectre d'étude le plus large possible. Ce genre d'exercice ne peut évidemment pas se faire tous les ans ni même tous les deux ou trois ans. Celui-ci a pris deux ans et les développeurs doivent avoir le temps d'apporter les améliorations à leurs modèles. Cependant, l'expérience acquise lors de ce *benchmark* ne pourra que faciliter la mise place du prochain. Fort de cette première réalisation utilisant un site Web, l'avenir devrait profiter d'outils plus performants comme la création de figures au choix des utilisateurs. Cette idée avait été proposée dès le début, mais des moyens réduits et des ambitions diverses n'avaient pas permis sa réalisation.

### 2.3 CIBLES ÉPAISSES - RÉACTIONS DE SPALLATION EN CASCADE

Si les *benchmarks* ouverts à tous sont peu nombreux pour les cibles minces (étude de la réaction de spallation en elle-même) (Blann et al. 1993, Michel et Nagel 1997, AIEA 2010), ils le sont tout autant, voire encore moins nombreux, pour les cibles épaisses (cascade de réactions de spallation). Une raison simple de cet état de fait est que les seconds nécessitent l'implantation des modèles de spallation dans un code de transport. Une des suites, une des extensions possibles du *Benchmark of spallation models* serait évidemment de continuer l'exercice sur des cibles épaisses. En attendant il y a eu le *Thick target benchmark for Lead and Tungsten* (Filges et al. 1995) de l'AEN entre 1992 et 1995 en lien avec les deux autres en cibles minces (Blann et al. 1993, Michel et Nagel 1997). Il reposait sur la comparaison des modèles entre eux pour la production de neutrons et de noyaux résiduels. Plus récemment, dans le cadre à la fois du projet européen NUDATRA et d'un projet de l'AIEA (*Coordinated Research Project on Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems* (Janczyszyn et al. 2011)), un autre *benchmark* cible épaisse a eu lieu, mais s'est concentré sur les résidus de spallation.

Pour illustrer le genre de résultats que l'on peut obtenir sur les cibles épaisses avec les modèles, je donne ci-après trois exemples auxquels j'ai contribué. Le premier concerne la production de neutrons et s'appuie sur des données prises à l'accé-

3. Des données (A. Bubak et al., PRC 76, 014618 (2007)) ont été fournies par F. Goldenbaum (FZJ), mais incorporées dans le jeu additionnel seulement.

4. Les codes de transport ne disposant pas toujours de bases de données pour ces cas, les modèles de spallation sont appelés et il est bien utile alors de connaître leur validité dans ces cas-là.

5. Pour ce *benchmark* on avait dix sept modèles ou combinaisons de modèles, plus de quatre vingt observables, passant sous silence les différents angles des spectres doublement différentiels et les différents isotopes pour les noyaux résiduels, ce qui déboucha sur quelque dix mille figures.

lérateur SATURNE. Les deux autres concernent la production de noyaux résiduels. L'un s'est fait dans le cadre du projet EURISOL-DS et l'autre est le *benchmark* évoqué juste précédemment (NUDATRA/AIEA).

### 2.3.1 Neutrons

Les premiers calculs faits avec la combinaison de modèles INCL4.2-Abla implantée dans LAHET3.16 ont porté sur les spectres de neutrons obtenus à SATURNE (cibles de différentes tailles, faites de différents matériaux, positionnées de différentes manières et bombardées par des protons de différentes énergies) (David et al. 2003). La liste de ces caractéristiques est donnée dans le tableau 2.4 et le dispositif expérimental par la figure 2.27 (Ménard 1998, Varignon 1999).

Cible	Énergie (MeV)	Diamètre (cm)	Longueur (cm)	Position (cm)
Plomb	0,8	10	40	30
		20	40	10
			65	10 - 30 - 50
	1,2	10	65	10 - 30 - 50
		20	65	10 - 30 - 50
			105	50 - 70
1,6	10	105	10 - 30 - 50	
	20	105	10 - 50	
Fer	0,8	10	40	10 - 30
		20	40	10 - 30
	1,2	10	65	10 - 30 - 50
		20	65	10 - 30 - 50
	1,6	10	105	10 - 30
		20	105	10 - 30
Tungstène	0,8	15	59	10
	1,6	15	59	10 - 30
Aluminium	1,6	20	105	10 - 30

TABLE 2.4 – Caractéristiques des expériences de spectres de neutrons faites à SATURNE en cibles épaisses.

Sur les figures ci-après les régions des cibles vues par les détecteurs sont données pour chaque angle à droite des graphes et matérialisées par les couleurs bleu foncé (zone vue totalement) et bleu clair (zone vue partiellement).

La figure 2.28 donne quatre exemples de résultats obtenus. On y voit les spectres de neutrons pour trois configurations données (énergie du projectile, géométrie et position de la cible, matériau de la cible) couvrant des énergies, masses atomiques des matériaux et zones vues par les détecteurs différentes. Sont représentées les données expérimentales, les résultats du modèle INCL4.2-Abla et du modèle Bertini-Dresner (modèle par défaut de LAHET et des différentes versions de MCNPX). Comme les modèles INCL4.2 et Abla ont été implantés de manière indépendantes, sur le graphe en haut à droite les résultats de la combinaison INCL4.2-Dresner sont reportés pour comparer les modèles Abla et Dresner.

La remarque principale que l'on peut faire des graphes de la figure 2.28 est que les modèles de spallation qui donnaient de bons résultats en cible mince repro-

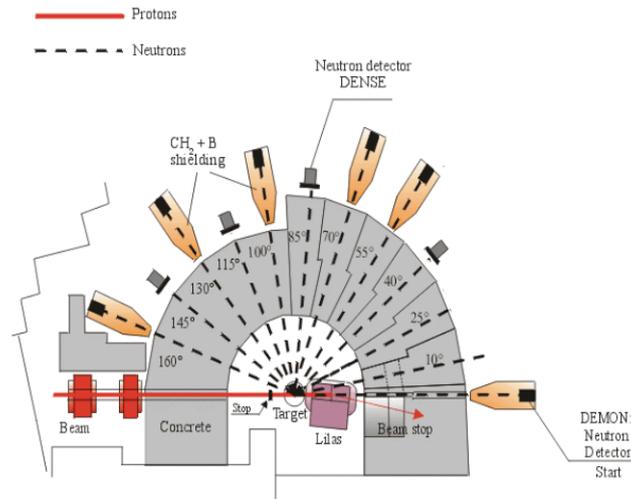


FIGURE 2.27 – Schéma de l'installation utilisée pour les mesures de spectres de neutrons sortant de cibles épaisses à SATURNE.

duisent aussi très correctement les spectres de neutrons produits en quelque endroit que ce soit par des cibles épaisses, indépendamment du matériau et de la taille de la cible, et de l'énergie du faisceau de protons. On peut cependant relever trois points où l'accord n'est pas parfait entre les données expérimentales et les modèles : les neutrons de 4-10 MeV émis vers l'avant, les neutrons de 10-30 MeV dans le cas  $p(1,6 \text{ GeV}) + \text{Fe}$  et la queue de distribution haute énergie parfois surestimée.

Sur les graphes du haut de la figure 2.28 on voit donc une surestimation des neutrons de 4-10 MeV émis vers l'avant pour les combinaisons de codes INCL4.2-Abla et INCL4.2-Dresner par rapport aux données expérimentales, alors que la combinaison Bertini-Dresner fonctionne bien. Un raisonnement simpliste tendrait à penser que le problème vient d'INCL4.2 qui donnerait une énergie d'excitation en fin de cascade trop élevée. Or ce problème de surestimation n'existe pas aux autres angles d'émission, d'une part, et, d'autre part, la production de neutrons dans cette gamme d'énergie et à ces angles en cible mince pour le même matériau et la même énergie de faisceau est en fait sous-estimé par INCL4.2-Abla comme le montre le graphe de gauche de la figure 2.29. Cet exemple montre clairement la difficulté d'analyse des résultats en cible épaisse où entrent en jeu le ralentissement des particules (projectiles du faisceau et émises) et la cascade des réactions secondaires. Pour les deux autres points, l'aide des données en cibles minces semblent ces fois-ci corroborer les résultats des cibles épaisses. Ainsi, pour illustrer, le graphe de droite de la figure 2.29 montre bien une surestimation des neutrons de 10-30 MeV par le code Bertini-Dresner, comme on le voit en cible épaisse sur le graphe en bas à gauche de la figure 2.28.

### 2.3.2 Noyaux résiduels

Comme indiqué dans l'introduction de la section 2.3, je présente ici deux cas de validation de modèles pour la production de noyaux résiduels en cibles épaisses. Le premier avait pour objectif de connaître la qualité des modèles de spallation envisagés pour les calculs de conception des cibles de l'installation EURISOL et le second était un *benchmark* ouvert à tous et s'appuyait sur une expérience faite dans le cadre de l'étude des ADS.

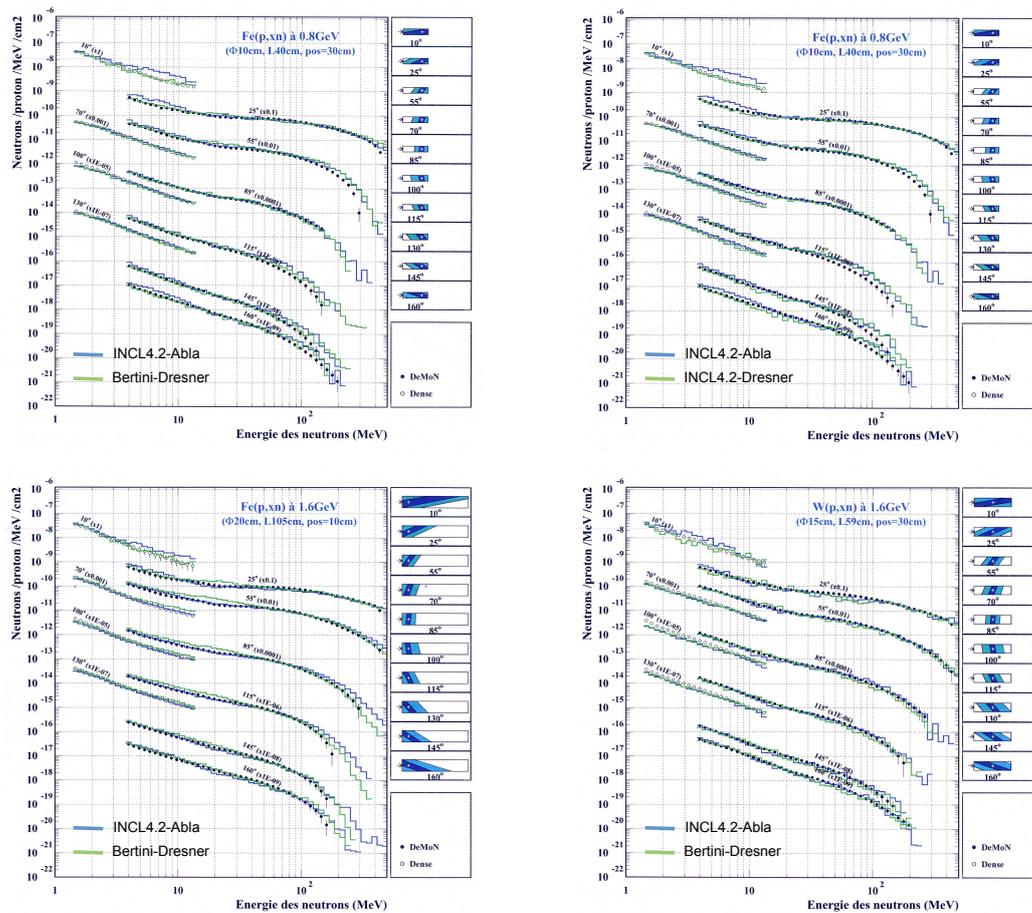


FIGURE 2.28 – Spectres de neutrons produits en cibles épaisses à SATURNE. En haut les deux graphes concernent la même expérience  $p(800 \text{ MeV})+\text{Fe}$ , alors que les graphes du bas les expériences  $p(1,6 \text{ GeV})+\text{Fe}$  (gauche) et  $p(1,6 \text{ GeV})+\text{W}$  (droite). Les caractéristiques des expériences sont indiquées sur les graphes ( $\Phi$  : diamètre ;  $L$  : longueur ;  $pos$  : position ; zones vues par les détecteurs données pour chaque angle à droite des graphes (bleu foncé (zone vue totalement) - bleu clair (zone vue partiellement))). Les modèles présentés sont indiqués sur les différents graphes.

### EURISOL-DS

Le projet EURISOL-DS (Cornell et al. 2009) visait à étudier le design du futur accélérateur européen produisant des faisceaux d'ions radioactifs par la méthode ISOL. Plusieurs options devaient être étudiées pour les cibles de production. Il y avait deux types de cibles. Les cibles directes où les noyaux radioactifs sont produits directement par les réactions de spallation dans la cible et les cibles de fission composés d'une cible de spallation servant de générateur de neutrons (convertisseur) qui produisent ensuite les noyaux souhaités par fission d'Uranium ou Thorium placé autour du convertisseur. Dans chacun des cas, mais surtout dans le premier, différents matériaux ont dû être étudiés. Pour faire correctement ce travail (développé au chapitre 3, section 3.2.1) il fallait avant tout connaître les performances des modèles que l'on allait utiliser dans ce cadre. Ainsi, prévoyant d'utiliser le code de transport MCNPX, on a lancé une série de validations sur

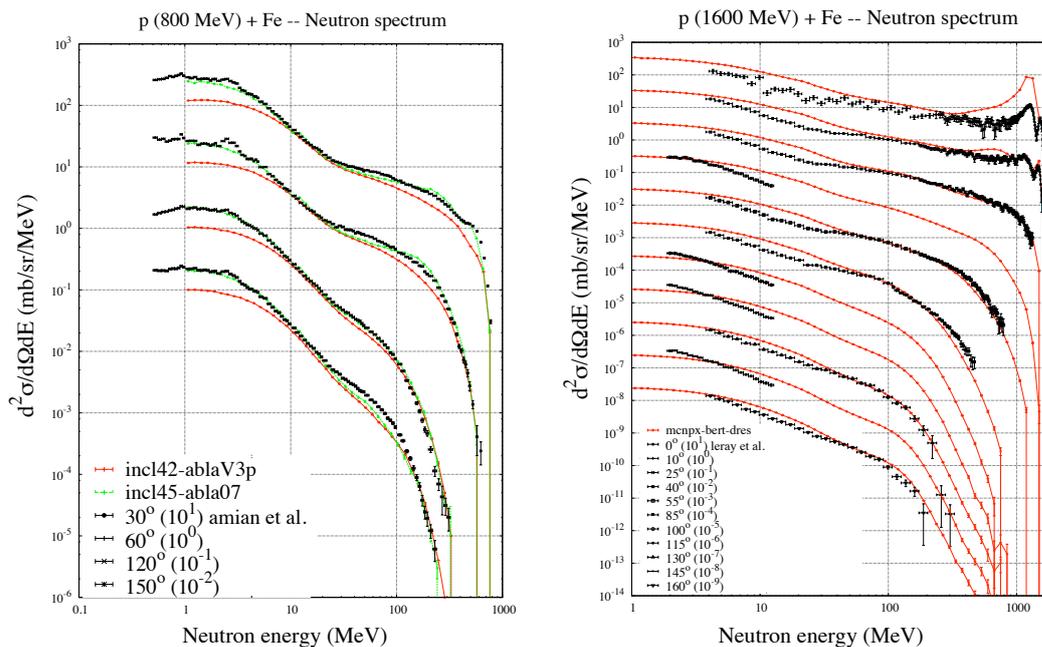


FIGURE 2.29 – Spectres de neutrons en cibles minces. A gauche, résultats des modèles INCL4.2-Abla (rouge) et INCL4.5-Abla07 (vert) pour la réaction  $p(800 \text{ MeV})+Fe$  (figure tirée du rapport de stage de S. Taylor (Taylor 2010) et, à droite, résultats du modèle Bertini-Dresner pour la réaction  $p(1600 \text{ MeV})+Fe$ .

la production des particules et des noyaux résiduels en cibles minces et en cibles épaisses (Rapp et al. 2006, David et al. 2007a;b). Ces validations nécessiteront des recherches de données expérimentales sur lesquelles tester les modèles et ce travail servira par la suite pour le *Benchmark of spallation models* développé dans la section précédente. Ici ce sont donc plus spécifiquement des résultats sur la validation de la production des noyaux résiduels en cibles épaisses dont il est question.

Nous avons utilisé deux types d'expériences, en fait les deux seules expériences en cibles épaisses qui, par chance, coïncidaient avec les caractéristiques d'EURI-SOL. Le premier type concerne des expériences faites à ISOLDE au CERN, et ce sont elles que j'aborde ci-dessous, et le second une expérience dont j'avais eu vent et dont j'ai pu utiliser les résultats avant publication grâce aux responsables W. Pohorecki et J. Janczyszyn (Université de Cracovie). Cette dernière est développée ensuite sous l'intitulé NUDATRA/AIEA, puisque c'est dans ce cadre officiel qu'elle s'est passée.

Les expériences faites à l'installation ISOLDE du CERN, et dont nous avons utilisé les résultats, consistent en l'irradiation d'une cible de UCx ou ThCx ( $\sim 50 \text{ g/cm}^2$ ) par des protons de 1,0 ou 1,4 GeV, puis en l'extraction par diffusion/effusion et mesures des noyaux produits, ici les gaz rares, et enfin détermination des rendements de production dans la cible après utilisation de coefficients d'efficacité obtenus par ailleurs. Plus de détails sont donnés dans la référence portant sur ces expériences, (Bergmann et al. 2003).

Les modèles testés ont été ceux disponibles dans le code de transport MCNPX2.5.0 et qui avaient donné les meilleurs résultats en cibles minces (David et al. 2007a), c'est à dire les combinaisons INCL4.2-Abla et Isabel-Abla, ainsi que le modèle CEM2k. Les mesures expérimentales correspondent aux distribu-

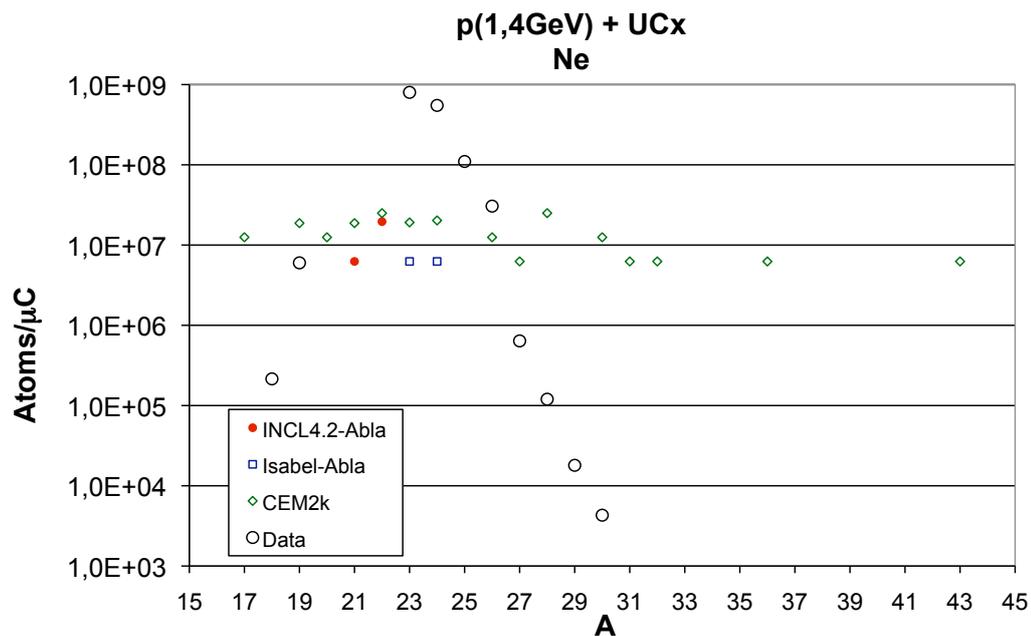


FIGURE 2.30 – Distributions en masse du Ne obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.

tions en masse des rendements (Atomes/ $\mu\text{C}$ ) de six éléments (He, Ne, Ar, Zn, Kr, Xe) pour le UCx et 2 éléments pour le ThCx (Kr, Xe).

Avec la cible de UCx les principales conclusions étaient qu'aucun des modèles ne réussissait à reproduire correctement les noyaux légers (Fig. 2.30), alors que les produits de fission posaient beaucoup moins de difficultés (Fig. 2.31), si on excepte la surestimation des noyaux riches ou pauvres en neutrons pour CEM2k. Le cas des noyaux légers sera corrigé en bonne partie dans les versions actuelles de INCL4.6-Abla07 et CEM03, Abla07 incorporant notamment une évaporation des noyaux légers et CEM03 ayant pour module de désexcitation non plus la version par défaut de MCNPX, mais une variante du modèle GEM (Furihata 2000, Furihata et al. 2001, Furihata et Nakamura 2002) ayant lui aussi une évaporation des noyaux légers. Pour ce qui est des produits de fission la Fig. 2.31 permet aussi de préciser le problème CEM2k. Sur cette figure sont reportées les différentes contributions à la production de chaque isotope, à savoir, d'une part la contribution des neutrons de basses énergies, fournie à l'aide d'une base de données (England et Rider 1994), et la contribution des neutrons de hautes énergies et des autres particules fournies par les modèles de spallation, et, d'autre part, par la contribution directe (*Indiv* pour individuelle) et la contribution des ascendants (*Cum* pour cumulative). Ainsi les surestimations constatées pour CEM2k étaient assurément liées au modèle de spallation.

Les résultats obtenus avec la cible de ThCx ont abouti aux mêmes conclusions à propos des produits de fission. La seule différence est un épaulement aux alentours de la masse  $A=140$  pour le Xe que l'on voit avec les mesures expérimentales, mais qu'aucun des trois modèles n'exhibent. La figure 2.32 donnant les différentes contributions pour le cas INCL4.2-Abla n'a pas permis de préciser si le problème pouvait venir des modèles de spallation ou de la base de données utilisée pour les neutrons de basses énergies.

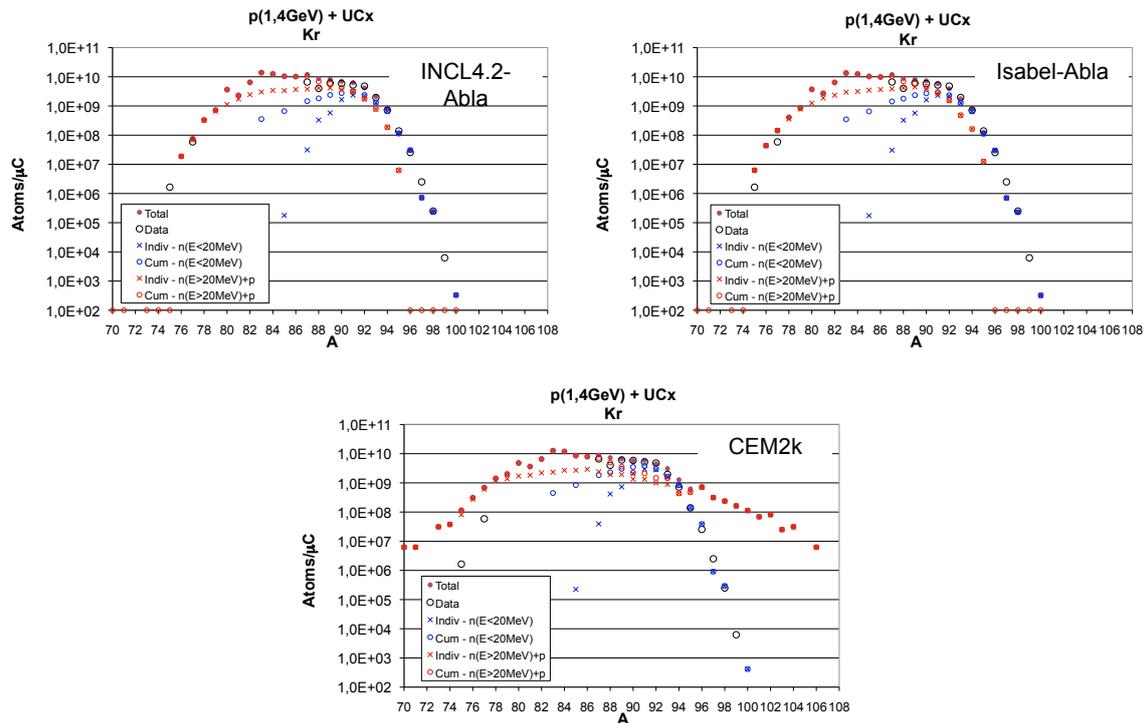


FIGURE 2.31 – Distributions en masse du Kr obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies ( $E \leq 20$  MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum)). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.

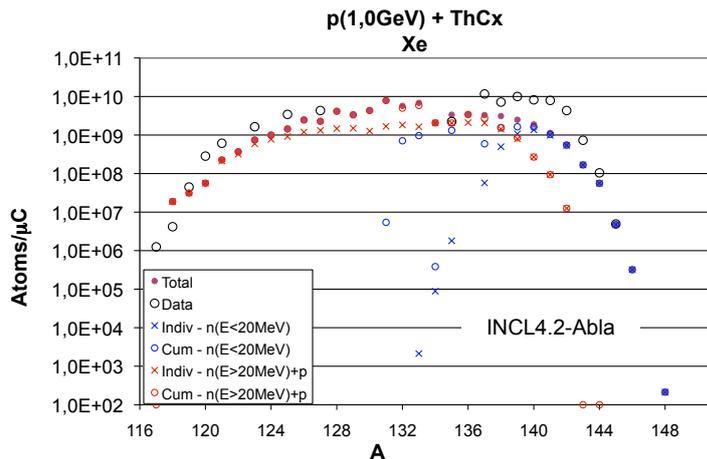


FIGURE 2.32 – Distributions en masse du Xe obtenues avec une cible épaisse de ThCx bombardée par des protons de 1,0 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies ( $E \leq 20$  MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum)). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.

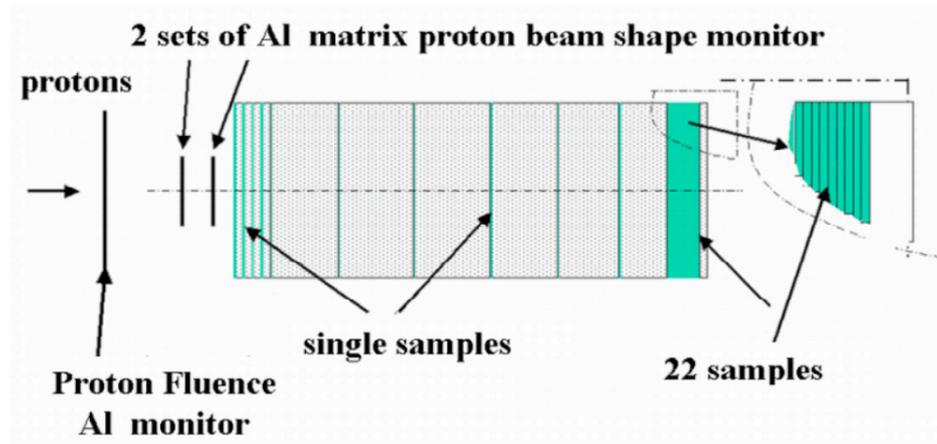


FIGURE 2.33 – Schéma de la cible de Plomb utilisée dans l'expérience faite à Dubna. Figure tirée de (Pohorecki et al. 2007).

Il faudrait bien sûr refaire tous ces calculs avec les nouvelles versions des modèles, mais en attendant est traitée avec INCL4.6-Abla07 une expérience ISOLDE similaire sur le cas de la production d'At par une cible de Pb-Bi dans le chapitre 3, page 116.

#### NUDATRA/AIEA

Les ADS étant une option possible pour réduire la quantité de déchets nucléaires par le biais de la transmutation, se pose la nécessité de disposer de bons outils de calcul pour concevoir ces systèmes pilotés par accélérateur et utilisant une cible de spallation. C'est dans cette optique qu'une étude des modèles de spallation, associés au code de transport dans lesquels ils sont implantés, a été entreprise à la fois comme une tâche du projet européen EUROTRANS/NUDATRA et comme projet de l'AIEA (*Coordinated Research Project on Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems*). Un des matériaux les plus souvent cités comme bons candidats pour une cible de spallation est le plomb. Les mesures expérimentales pouvant servir de comparaison aux résultats de calcul étant rares<sup>6</sup>, une expérience a été mise au point pour obtenir les distributions axiales d'activité de radionucléides dans un cylindre de plomb bombardé par un faisceau de protons de 660 MeV à Dubna (JINR - Russie) (Janczyszyn et al. 2011). La figure 2.33 indique les trente-deux emplacements où ont été faites les mesures d'activités. Le cylindre de plomb avait une longueur de 30,8 cm et un diamètre de 8 cm. La liste des isotopes dont les activités ont été mesurées est la suivante :  $^{46}\text{Sc}$ ,  $^{59}\text{Fe}$ ,  $^{60}\text{Co}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{75}\text{Se}$ ,  $^{83}\text{Rb}$ ,  $^{85}\text{Sr}$ ,  $^{88}\text{Y}$ ,  $^{88}\text{Zr}$ ,  $^{95}\text{Nb}$ ,  $^{95}\text{Zr}$ ,  $^{102m}\text{Rh}$ ,  $^{102}\text{Rh}$ ,  $^{110m}\text{Ag}$ ,  $^{121m}\text{Te}$ ,  $^{121}\text{Te}$ ,  $^{139}\text{Ce}$ ,  $^{172}\text{Hf}$ ,  $^{172}\text{Lu}$ ,  $^{173}\text{Lu}$ ,  $^{175}\text{Hf}$ ,  $^{183}\text{Re}$ ,  $^{185}\text{Os}$ ,  $^{194}\text{Au}$ ,  $^{194m2}\text{Ir}$ ,  $^{195}\text{Au}$ ,  $^{203}\text{Hg}$  et  $^{207}\text{Bi}$ . Des calculs de chaleurs dégagées étaient aussi demandés, mais aucune mesure n'a été faite, donc pas de comparaison calcul/mesure possible.

Le *benchmark* fut présenté la première fois à la conférence ND2007 (Pohorecki et al. 2007). Seize laboratoires ont fait savoir leur intérêt pour cet exercice, mais malheureusement quatre seulement ont effectivement participé en comptant

6. Il faut noter ici une expérience avec une cible de plomb et un faisceau de protons de 800 MeV dont les résultats ne sont publiés que dans une thèse : M. Ducauze, "Étude des noyaux résiduels de spallation produits dans des cibles minces de plomb et de tungstène et dans une cible épaisse de plomb", Université Paris XI Orsay (2001).

Participant No and model/code	C/E															
	Nuclide															
	<sup>60</sup> Co	<sup>65</sup> Zn	<sup>83</sup> Rb	<sup>86</sup> Sr	<sup>88</sup> Y	<sup>95</sup> Nb	<sup>102</sup> Rh	<sup>102m</sup> Rh	<sup>121m</sup> gTe	<sup>173</sup> Lu	<sup>175</sup> Hf	<sup>183</sup> Re	<sup>185</sup> Os	<sup>194</sup> Au/Hg	<sup>203</sup> Hg	<sup>207</sup> Pb
1.CEM 0301	0.65	1.67	1.40	1.19	1.31	0.57	-	-	-	1.58	1.70	1.68	1.06	0.82	0.55	1.42
1.CEM 2k	0.40	1.43	0.45	0.45	0.47	0.23	0.40	0.21	0.37	0.72	0.84	1.34	1.10	1.12	0.49	1.66
3.CEM	0.41	1.45	0.44	0.46	0.50	0.24	0.40	0.20	-	0.76	0.82	1.34	1.11	1.64	0.77	1.77
2.CEM2k	9.81	1.42	1.35	69.24	0.96	8.63	0.25	0.13	60.80	0.01	0.02	0.19	0.04	8307.88	0.64	1.78
1.Bert_Dres	0.41	1.20	0.39	0.33	0.38	0.23	0.42	0.22	0.51	1.30	1.24	1.53	1.05	0.85	1.30	1.40
3.Bert_Dres	0.46	1.41	0.39	0.32	0.38	0.24	0.42	0.22	-	1.36	1.29	1.54	1.07	1.35	1.44	1.47
1.Bert_Abla	0.43	0.61	0.44	0.37	0.38	0.36	0.67	0.34	0.42	0.99	1.07	1.46	1.16	0.94	1.32	1.06
2.Bert_Abla	7.94	0.84	2.05	68.82	1.17	8.33	0.41	0.21	65.80	0.01	0.02	0.24	0.06	8021.72	1.20	1.09
1.INCL4_Abla	0.51	0.54	0.53	0.45	0.44	0.64	0.84	0.43	0.59	0.38	0.49	0.96	0.82	0.93	1.61	1.17
3.INCL4_Abla	0.55	0.62	0.49	0.48	0.48	0.67	0.94	0.48	-	0.42	0.47	0.96	0.83	1.38	1.70	1.22
1.INCL4_Dres	0.51	0.47	0.57	0.44	0.45	-	0.89	0.46	0.56	0.38	0.48	0.97	0.82	0.92	1.62	1.17
2.INCL4_Dres	11.35	0.99	2.53	69.60	1.55	8.33	0.53	0.27	56.84	0.01	0.01	0.17	0.04	9185.42	1.65	1.18
1.Isabel_Abla	0.39	0.58	0.48	0.42	0.45	0.51	0.85	0.44	0.51	0.65	0.75	1.29	1.08	1.00	1.02	1.85
2.Isabel_Abla	11.47	0.96	2.48	66.71	1.42	8.44	0.49	0.25	57.76	0.01	0.01	0.22	0.06	6715.72	1.22	1.98
1.Isabel_Dres	0.42	1.16	0.33	0.28	0.35	0.23	0.41	0.21	0.47	0.93	0.97	1.44	1.04	0.92	1.30	1.40
3.Isabel	1.00	1.25	0.96	0.79	0.84	0.80	1.38	0.71	-	0.94	0.91	1.26	1.02	1.55	0.83	1.15
1.FLUKA	0.72	1.00	0.98	0.85	0.96	0.55	-	-	-	0.48	0.56	0.90	0.75	1.02	0.62	1.01

1.1 &gt; C/E &gt; 0.9

1.2 &gt; C/E &gt; 0.8

0.2 &gt; C/E &gt; 5

FIGURE 2.34 – Résultats cumulatifs des rapports calcul/mesure pour les activités des radio-nucléides dans la cible entière, prenant en compte les temps d’irradiation et de refroidissement (Janczyszyn et al. 2011). Les chiffres devant les noms des modèles correspondent à un participant donné (exemple : CEA-Saclay = 3).

les organisateurs, à savoir l’université de Cracovie. Les trois autres laboratoires étaient : IPEN (Brésil), CIEMAT (Espagne) et le CEA-Saclay. Parmi les possibles raisons du faible nombre de participants on peut sans doute citer le temps de calcul. Pour prendre l’exemple de INCL4.2-Abla, qui n’était certes pas le plus rapide pour une telle géométrie, le temps de calcul nécessaire pour avoir une statistique correcte était de quarante jours ! Si bien sûr on peut lancer quelques calculs en parallèle, il faut ajouter à ce temps celui nécessaire pour les calculs d’activité prenant en compte le temps d’irradiation et de refroidissement avant la mesure. La publication des résultats eut lieu en 2011 sous la forme d’un rapport (Janczyszyn et al. 2011).

Tous les modèles ou combinaisons de modèles disponibles dans MCNPX2.5.0 ont été testés ainsi que la version CEM03 de MCNPX2.6 (Pelowitz 2008) et le code FLUKA (Fassò et al. 2003, Ferrari et al. 2005). Dans les faits des instituts différents ont utilisé parfois les mêmes modèles. Ceci dit, les résultats obtenus nécessitaient l’aide d’un code d’évolution pour prendre en compte les temps d’irradiation et de refroidissement, ce qui explique sans doute des différences dans les résultats obtenus. Une étude de la cohérence de ces résultats est donnée dans le tableau tiré de (Janczyszyn et al. 2011), figure 2.34. Ainsi il est clair que les résultats du participant numéro 2 sont systématiquement faux et donc n’ont pas été pris en considération par la suite. Nous étions les participants numéro 3 et avons fait les calculs avec la version par défaut de MCNPX, i.e. Bertini-Dresner, ainsi qu’avec les trois modèles que nous avons jugés les meilleurs pour le projet EURISOL (voir le cas précédent, EURISOL-DS), à savoir INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k.

Se basant notamment sur le tableau cité précédemment, les organisateurs du *benchmark* ont pu conclure pour l’ensemble de la cible que les activités calculées par les modèles étaient très souvent dans un facteur 2 par rapport aux mesures expérimentales et même souvent meilleures. Pour ce cas les meilleurs modèles étaient Isabel-Abla et FLUKA, et le moins bon Bertini-Dresner. Cependant un intérêt de l’expérience faite et utilisée comme référence était les distributions axiales. Pour ces résultats seulement quatre modèles ont pu être comparés aux données expérimentales : Bertini-Dresner, CEM2k, INCL4-Abla et Isabel-Abla. Si bien entendu

les figures représentant les distributions ont été utilisées pour l'analyse, et plus loin des exemples sont montrés, des facteurs de déviation ont là aussi été utilisés pour aider à l'analyse. Les deux facteurs utilisés étaient :

$$D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| 1 - \frac{C_i}{E_i} \right|,$$

$$H = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{E_i - C_i}{\sigma_{E,i} + \sigma_{C,i}} \right)^2},$$

avec  $C_i$  ( $E_i$ ) l'activité calculée (mesurée) et  $\sigma_{C,i}$  ( $\sigma_{E,i}$ ) l'incertitude associée. Ces facteurs, dont les valeurs pour les différents isotopes et modèles sont données par la figure 2.35 pour le facteur  $H$ , ont permis d'arriver aux mêmes conclusions globales que pour la cible entière, c'est à dire que Isabel-Abla était le meilleur modèle suivi de INCL4-Abla, puis CEM2k et Bertini-Dresner. Cette même figure montre cependant aussi que l'on ne peut se contenter d'une analyse globale. Ainsi, par exemple, CEM2k est le meilleur pour le  $^{88}\text{Zr}$ , alors que c'est Bertini-Dresner pour le  $^{185}\text{Os}$ , Isabel-Abla donne les moins bons résultats pour le  $^{194}\text{Au}$  et INCL4-Abla de son côté est celui qui fluctue le moins suivant les isotopes.

Nuclide	CEM	BerDre	INCL4Abla	Isabel
Sc46	0.76	1.76	2.20	0.99
Fe59	2.55	2.02	1.97	2.02
Co60	4.64	4.71	4.72	1.73
Zn65	2.60	2.36	3.48	2.44
Se75	1.16	3.25	2.51	2.57
Rb83	4.99	5.71	4.41	1.14
Sr85	4.13	4.96	4.08	1.76
Y88	5.14	5.09	5.29	2.99
Zr88	0.97	2.55	5.24	1.65
Nb95	9.66	6.19	2.44	2.09
Zr95	9.78	6.77	4.44	3.58
Ce139	2.07	0.44	0.42	0.38
Hf172	4.26	5.85	3.24	2.76
Lu172	1.50	2.85	2.52	0.61
Lu173	3.30	1.92	3.07	1.03
Hf175	1.08	1.02	2.45	0.58
Re183	1.81	2.01	1.15	1.00
Os185	0.74	0.65	1.50	0.86
Au194	3.74	1.52	0.97	3.69
Au195	1.70	1.27	5.25	2.37
Hg203	4.03	6.45	5.05	1.25
Bi207	15.19	13.93	6.13	9.53
average	3.90	3.79	3.30	2.14

\*/each value represents all points of one distribution along the target

Nuclide	CEM	BerDre	INCL4Abla	Isabel
Bi207 – cont.	7.19	4.73	2.81	2.02
Bi207 – peak*	11.01	8.36	6.65	6.80
Bi207 – peak**	-	-	2.34	2.51

\*/values obtained after shifting the calculated peak by 5 mm towards the target front,

\*\*/as above but after discarding the right side of the peak (from 29.3 mm)

1.0 > H > 0

2.0 > H ≥ 1.0

FIGURE 2.35 – Valeurs du facteurs  $H$  pour les modèles et les isotopes\* [ref - J. Janczyszy-net al., "Benchmark on radionuclides production and heat generation rates in lead target exposed to 660 MeV protons"- AGH Faculty of Energy and Fuels - AGH - University of Science and Technology (Krakow 2011)].

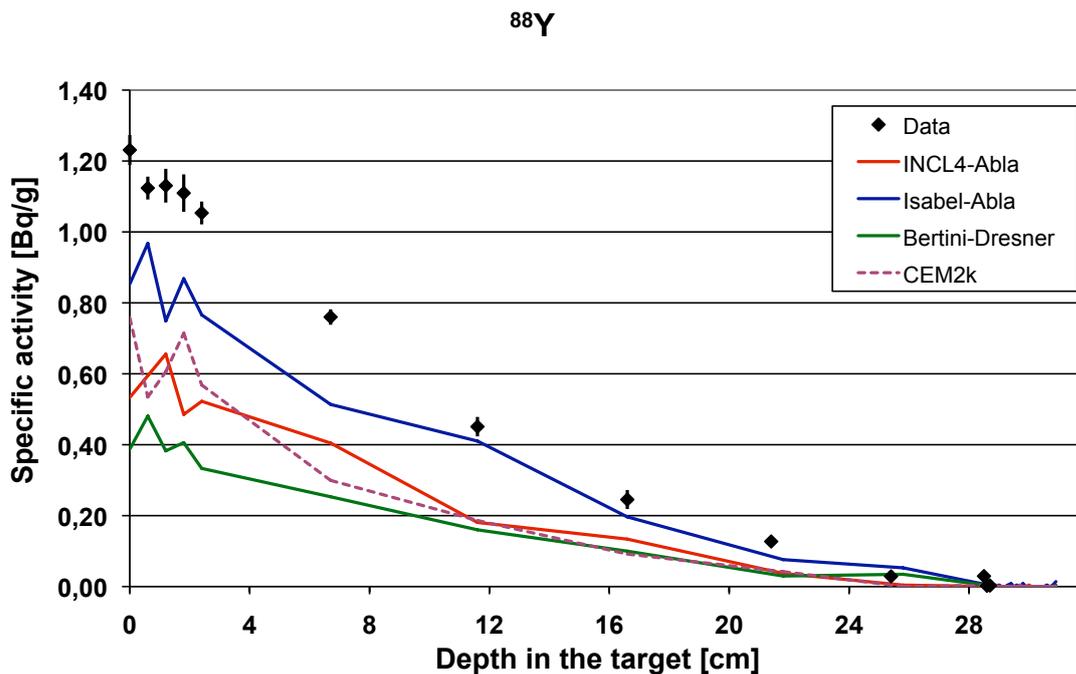


FIGURE 2.36 – Distribution axiale de l'activité spécifique du  $^{88}\text{Y}$  dans la cible de plomb décrite dans cette section. Les versions des modèles utilisés sont celles implantées dans le code de transport MCNPX2.5.0. Les données sont celles de l'expérience (Janczyszyn et al. 2011).

Ce *benchmark* sur une cible épaisse a d'abord bien sûr permis de faire l'état des lieux des performances des modèles existants sur la production de radioisotopes dans le cas d'une cible de plomb bombardée par des protons de 660 MeV. Il a aussi montré que, d'une part, suivant les objectifs visés, ici le type de noyaux produits, les conclusions peuvent varier, et que, d'autre part, il est difficile parfois d'analyser ou prédire ce genre de résultats, parce que les réactions en jeu sont dues non seulement au faisceau dont l'énergie se dégrade par ralentissement plus on entre dans la cible, mais aussi aux particules secondaires. Sur ce dernier point des exemples étudiés dans la référence (David et al. 2007b) montre que si les protons primaires sont très souvent les principaux responsables de la production des isotopes, il y a des cas où la contribution des particules secondaires n'est pas à négliger.

Enfin, comme pour tout *benchmark* il faudrait bien entendu refaire ce genre d'exercice chaque fois que des améliorations notables sont faites dans les modèles. Ainsi, pour ne prendre que deux isotopes en exemple et la combinaison des modèles INCL et Abla, on peut voir à la fois sur la figure 2.36 et la figure 2.37 que INCL4.2-Abla ne donnait pas les meilleurs résultats pour le  $^{88}\text{Y}$  et que le  $^{173}\text{Lu}$  était un des isotopes les moins bien reproduits. Or, les résultats concernant les fonctions d'excitation de ces deux isotopes sur une cible de plomb se sont nettement améliorées avec la version INCL4.5-Abla07, figure 2.38, ce qui laisse à penser que cette dernière version devrait reproduire beaucoup mieux ces isotopes en question.

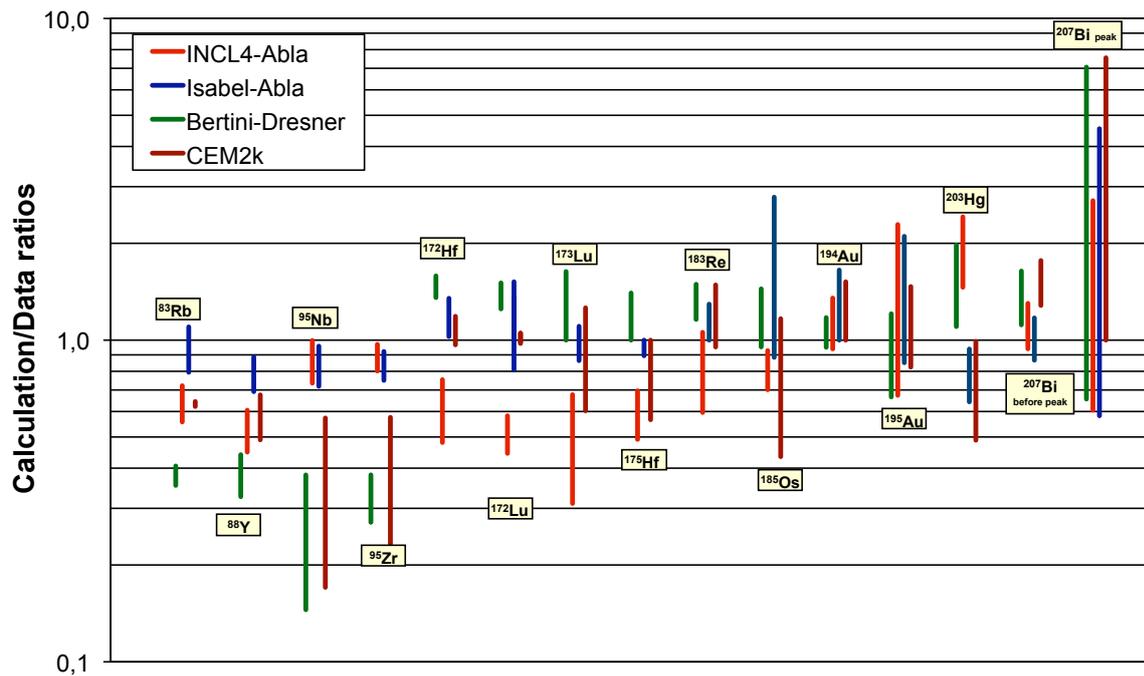


FIGURE 2.37 – Rapports Calcul/Mesure des activités pour les noyaux dont les calculs ont fourni une production significative (plus de 100 noyaux). Pour chaque isotope (masse croissante de la gauche ( $^{83}\text{Rb}$ ) vers la droite ( $^{207}\text{Bi}$ )) le trait représente la gamme de ces rapports le long de la cible. Pour le  $^{207}\text{Bi}$  on a séparé le pic de Bragg dont la position est souvent délicate à reproduire. Les versions des modèles utilisés sont celles implantées dans le code de transport MCNPX2.5.0.

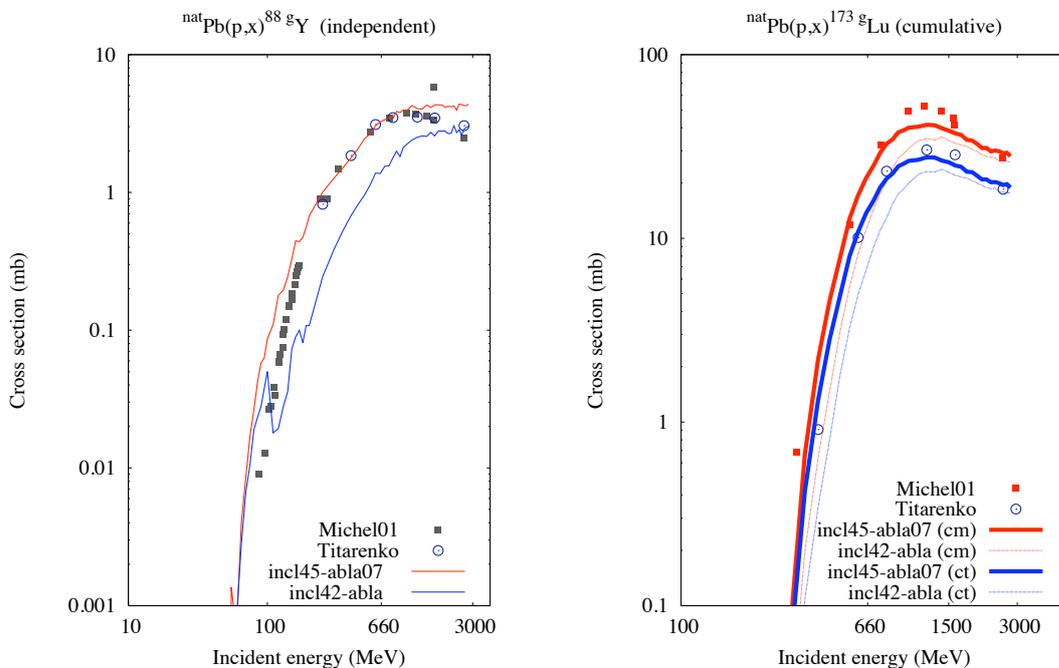


FIGURE 2.38 – Fonctions d'excitations dans une cible de plomb naturel bombardée par des protons. À gauche l'isotope  $^{88}\text{Y}$  et à droite l'isotope  $^{173}\text{Lu}$ . Dans le cas du  $^{173}\text{Lu}$  la production est cumulative, prenant en compte les ascendants. Les techniques d'extraction de ces productions cumulatives étant différentes suivant les expériences les résultats de calcul ont donc été obtenus différemment suivant l'expérience (rouge : Michel01 - cm ; bleu : Titarenko - ct). Ce point technique est abordé au chapitre 3, page 95.

## CONCLUSION DU CHAPITRE

La validation d'un modèle de spallation peut se faire dans un cadre privé (étude particulière) ou de manière publique (intercomparaison de modèles ouverte à tous), en utilisant des cibles minces (réaction de spallation proprement dite - caractère microscopique) ou des cibles épaisses (prise en compte du transport des particules et des réactions secondaires - caractère macroscopique), en tant que développeur ou utilisateur. Dans chaque cas l'approche est forcément différente et ce chapitre a essayé de montrer ces différentes facettes. Encore aujourd'hui, malgré de nombreuses campagnes de validation, il est toujours bien difficile de répondre brièvement et sans hésitation aux deux questions suivantes : *quels sont les mécanismes des réactions de spallation ? et quel modèle dois-je utiliser pour ma simulation ?*

Les choses avancent cependant. Lorsque l'on reprend l'évolution des modèles de spallation depuis leur naissances, ou pour simplifier, depuis une vingtaine d'années, au travers des différents *benchmarks* mentionnés dans ce chapitre, l'on voit les progrès importants qui ont été accomplis. De plus des études comparatives permettent de peser l'importance de tel ou tel mécanisme (une phase de *pré-équilibre* n'est pas absolument nécessaire, les noyaux dits de masse intermédiaire ( $A \leq 20$ ) ne sont pas tributaires d'un mécanisme de multifragmentation, pour ne citer que ces exemples).

Il n'y a toujours pas un modèle qui soit capable de donner entière satisfaction<sup>7</sup>, mais certains sortent régulièrement du lot, comme notre combinaison INCL4.6-Abla07. D'ailleurs, si les implantations dans MCNPX, puis GEANT4, l'étaient de notre propre chef, le fait, que les développeurs de PHITS et de MARS aient voulu tester ces modèles dans leur code de transport, montre l'intérêt qu'ils ont acquis, notamment en gommant au maximum leurs défauts et en étendant leur domaine de validité. Tout ceci n'aurait jamais pu se faire sans des validations les plus complètes possibles.

---

7. Ce qui ne sera jamais le cas, puisque les limites mêmes définissant ces réactions sont floues, du fait que ces réactions ne sont qu'un maillon diffus de la famille des réactions nucléaires.

Dans le chapitre 1 j'ai discuté de la modélisation des réactions de spallation, de leur compréhension jusqu'aux codes de transport de particules permettant des simulations où elles sont en jeu. Dans le deuxième chapitre j'ai abordé le thème de la validation des modèles aussi bien du point de vue des réactions en elles-mêmes, i.e. au sens microscopique, que du point de vue pratique, i.e. des résultats finaux après de nombreuses cascades de réactions dans des cibles massives. Ce chapitre 3 est dédié, lui, à l'utilisation des codes de spallation. C'est donc en tant qu'outil que les réactions de spallation sont discutées ici.

J'ai choisi de présenter les différentes utilisations de l'outil *spallation* que j'ai pu en faire en les regroupant en deux grands thèmes (sections). Le premier présente la modélisation de la spallation comme possible moyen pour construire diverses bases de données utilisables a posteriori. Le second concerne des simulations pour des installations, existantes ou en conception, qui utilisent des cibles de spallation.

## 3.1 BASE DE DONNÉES

Les bases de données sont des bibliothèques d'informations. Ces informations peuvent être multiples, comme, par exemple, des sections efficaces, intégrées ou différentielles (en énergie et/ou en angle), des rendements de produits de fission, etc. Ces bases peuvent être utilisées par des codes de transport ou comme ingrédient pour calculer des taux de productions d'isotopes, et elles peuvent avoir des formats simples (ASCII) ou complexes (ex. : ENDF, ACE). Je présente ci-dessous trois exemples, traitant de sujets très différents, mais en lien avec des bases de données.

### 3.1.1 Protonthérapie

La protonthérapie est une voie de plus en plus prisée pour le traitement de certaines tumeurs. En France deux centres existent, le CPO (Centre de Protonthérapie d'Orsay) et le centre Lacassagne à Nice, et d'autres sont prévus (Toulouse, Lyon). Récemment le CPO a subi une rénovation complète et s'est notamment doté d'un accélérateur de nouvelle génération dont l'énergie des protons est passée à 230 MeV (201 MeV précédemment). Un point important dans le traitement est la mise en place de celui-ci (planification). Ainsi des simulations doivent être faites pour aboutir à la dose voulue à l'endroit voulu.

C'est dans ce cadre que nous nous sommes impliqués dans le projet PROUESSE (**PR**otonthérapie : développement et validation d'un **O**util de modélisation **Et Simulation** monte carlo précise et rapide du dépôt de **doSE**). L'objectif de ce projet financé par l'ANR était de développer un code monte-carlo fiable et rapide pour la planification des traitements en remplacement de codes analytiques. Les codes monte-carlo sont en général plus précis que les codes analytiques, mais ils pèchent par leur temps de calcul. Aussi, le CEA/DRT a été chargé de mettre au point ce code, basé sur le code pénélope (Salvat et al. 2006) qui ne prend en compte que les  $\gamma$  et les électrons, et le CEA/DSM (le groupe spallation du SPhN) de définir les particules à prendre en compte pour la dose délivrée, de fournir les bases de données nécessaires, permettant ainsi de s'affranchir des modèles de réaction et ainsi gagner du temps de calcul, et enfin de procéder aux simulation avec le code de transport MCNPX afin de comparer avec le code PROUESSE et de valider ce dernier.

Ce travail a été mené principalement par B. Braunn, post-doc dans le groupe spallation du SPhN. Lors d'une précédente étude (Stankovskiy et al. 2007), A. Stankovskiy a montré que les protons étaient les seules particules à prendre en compte en ce qui concernaient les interactions nucléaires. Partant de ces conclusions, qui ont été vérifiées, le travail s'est scindé en deux parties, l'une traitant la réaction proton-noyau et l'autre la réaction spécifique proton-hydrogène. Mon but étant de discuter tout ce qui concerne les réactions de spallation je ne discuterai pas cette dernière partie. Le travail de simulation avec MCNPX étant en cours pendant la rédaction de ce mémoire il n'est pas développé ici.

Des bases de données existent déjà pour les protons (LA150h (Chadwick et al. 1999), ICRU (ICRU63 2000), TENDL (Koning et Rochman 2010)), mais malheureusement aucune n'est suffisante dans le cadre de PROUESSE. Si parfois des noyaux manquent, c'est surtout la gamme en énergie qui n'est pas assez étendue vers les hautes énergies, à savoir 250 MeV. Le choix du code pour créer cette base s'est porté sur TALYS1.4 (Koning et al. 2011). Les deux raisons étaient que i) la gamme en énergie correspondait bien à la physique de ce code basée sur le modèle optique et que ii) TALYS dispose des outils nécessaires à la mise en forme des données de sortie dans le format ENDF, format à partir duquel il est aisé d'obtenir le format ACE utilisé par le code MCNPX. La base construite regroupe les distributions angulaires élastiques, les sections efficaces totales et non-élastiques, les sections efficaces de production des particules et noyaux, ainsi que leurs spectres en énergie, pour vingt-trois éléments, soit cinquante-neuf isotopes.

Cette étude mériterait d'être plus amplement détaillée, mais encore une fois mon propos est spécifiquement les réactions de spallation, aussi je préfère maintenant faire le lien avec nos codes de spallation. Si nous ne les avons pas utilisés c'est d'une part parce que nous ne pouvons pas pour l'instant sortir les résultats sous le format ENDF, même si ce problème n'est que technique, et que d'autre part la gamme en énergie dont il est question est juste en dessous de la limite inférieure des hypothèses de la spallation. Ceci étant dit, on a montré dans les chapitres précédents que le modèle INCL4 avait été étendu vers les basses énergies et qu'il donnait des résultats satisfaisants (cf. Fig. 2.21, page 73). Il était alors intéressant de voir ce que valait, dans le cadre de la protonthérapie, la combinaison INCL4.6-Abla07 pour la production des différentes particules ou noyaux en fonction de l'énergie du proton incident et ceci pour trois des noyaux les plus importants dans le corps humains, à savoir le carbone, l'oxygène et le calcium. La figure 3.1 donne

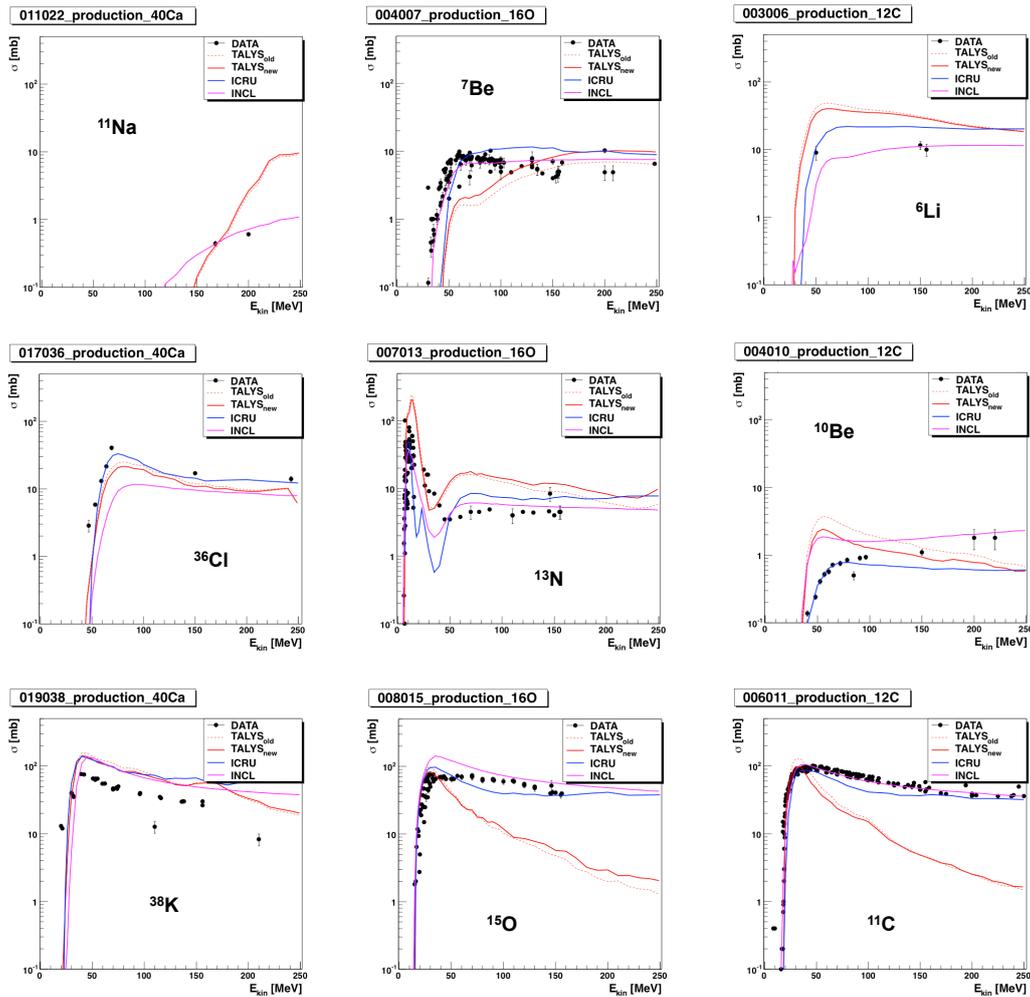


FIGURE 3.1 – Exemples de sections efficaces de production d’isotopes en fonction de l’énergie du proton incident sur des cibles de  $^{40}\text{Ca}$  (à gauche), de  $^{16}\text{O}$  (au centre) et de  $^{12}\text{C}$  (à droite). INCL correspond à la combinaison INCL4.6-Abla07, TALYS<sub>old</sub> à la version standard de TALYS1.4, TALYS<sub>new</sub> à des résultats de TALYS1.4 où B. Braunn a ajusté certains paramètres (cf. note de bas de page 1, page 93) et ICRU une base de donnée.

des exemples de résultats obtenus, comparés aux données expérimentales, au code TALYS<sup>1</sup> et à la base de données ICRU (ICRU63 2000).

D’une manière générale les résultats d’INCL4.6-Abla07 ne craignent pas la comparaison avec le code TALYS ou la base de données ICRU. S’il y a bien sûr des cas où INCL4.6-Abla07 peut encore faire des progrès, par exemple  $^{36}\text{Cl}$  sur le  $^{40}\text{Ca}$  ou  $^{10}\text{Be}$  sur le  $^{12}\text{C}$ , il y en a d’autres où les résultats d’INCL4.6-Abla07 sont équivalents voire meilleurs, par exemple  $^7\text{Be}$  sur le  $^{16}\text{O}$  ou  $^{11}\text{C}$  sur le  $^{12}\text{C}$ . Il faut bien sûr garder en tête qu’une base de données comme celle nécessaire au projet PROUESSE doit contenir des sections efficaces qu’un code de spallation ne donne pas, comme les distributions angulaires élastiques. Cependant, en ce qui concerne

1. B. Braunn, en lien avec A. Köning un co-développeur de TALYS, a ajusté certains paramètres du modèle pour reproduire au mieux, lorsque c’était possible, les données utiles dans le cadre de PROUESSE. Ainsi sur la figure 3.1 l’indice *old* fait référence à la version standard de TALYS1.4 et l’indice *new* à la version ajustée.

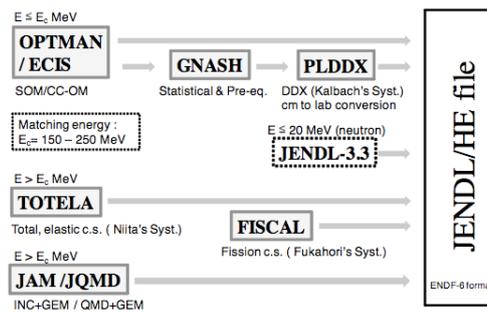


FIGURE 3.2 – Vue schématique des différents codes utilisés pour construire la bibliothèque JENDL haute énergie. Figure tirée de (Watanabe et al. 2011).

d'autres informations comme celles présentées sur la figure 3.1, la question de faire l'effort de sortir les résultats dans des formats adéquats comme ENDF pourrait se poser. D'ailleurs, même si les modèles de spallation sont toujours utilisés dans les codes de transport du fait d'un spectre en énergie très large, des voies de sorties très nombreuses et parce qu'ils permettent de garder toutes les corrélations, certaines personnes réfléchissent à la construction de base de données englobant le domaine de la spallation (voir section suivante).

### 3.1.2 Activation

L'idée d'une base de données pour la spallation fait son chemin. Au Japon une base de données nucléaires pour le transport des neutrons et protons jusqu'à 3 GeV est déjà en construction. La dernière version est JENDL/HE-2007 (Watanabe et al. 2011). Cette base contient les sections efficaces totales, les sections efficaces de diffusion élastiques et les distributions angulaires, les sections efficaces non-élastiques, les sections efficaces de production des isotopes et particules et pour ces dernières les sections efficaces doublement différentielles. Pour arriver à cela c'est tout un ensemble de codes qui est utilisé, illustré sur la figure 3.2 tiré de et explicité dans la référence (Watanabe et al. 2011). C'est un ambitieux projet (une quinzaine de personnes de neuf instituts) qu'il est intéressant de suivre, mais de notre côté, si nous n'avons pas les moyens, nous n'avons pas non plus la volonté pour l'instant de nous lancer dans une telle aventure. Il faut noter aussi que ce genre de travail nécessite des mises à jour régulières au fur et à mesure des améliorations et que, comme on le verra dans la section 3.2.2, pour être complète les bibliothèques doivent aussi prendre en compte les particules composites secondaires. Enfin, d'autres bibliothèques sont en cours de développement et la figure 3.3, tirée de (Korovin et al. 2010), en donne une liste.

Notre apport dans le domaine de l'activation de matériaux par des protons incidents de hautes énergies, c'est à dire au-delà de 150 MeV, s'est d'abord cantonné à un état des lieux de nos modèles sur des données expérimentales de fonctions d'excitation de production d'isotopes sur des cibles de plomb et de bismuth, deux des matériaux que l'on retrouve souvent dans les cibles de spallation. Ainsi mon but dans cette section est de montrer à la fois les résultats que l'on a obtenus au moment, les calculs avaient été faits avec INCL4.2-Abla, et les améliorations sur ce genre d'observables avec la nouvelle version INCL4.5-Abla. Mais avant cela je voudrais mentionner la difficulté à reproduire correctement certaines de ces données qui sont dites *cumulatives*.

Les sections efficaces de production d'isotopes en fonction de l'énergie du pro-

**Table 1**  
The largest available evaluated proton activation nuclear data libraries.

Library	Number of files/Nuclear charge number range	Primary proton energy range
The European Activation File, EAF-2007 [5]	816/1–100	up to 60 MeV
Proton Activation Data File, PADF-2007 [6]	2355/12–88	up to 150 MeV
JENDL High Energy File 2007, JENDL/HE-2007 [7]	106/1–95	up to 3 GeV
Joint Evaluated Fission and Fusion File, JEFF-3.1 [8]	26/20–83	up to 200 MeV
TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library, TENDL-2009 [9]	2375/6–110	up to 200 MeV
<b>High-Energy Proton Activation Data, HEPAD-2008</b>	<b>682/1–84</b>	<b>up to 1 GeV</b>

**Table 2**  
The largest available evaluated neutron activation nuclear data libraries.

Library	Number of files/Nuclear charge number range	Primary proton energy range
The European Activation File, EAF-2007	816/1–100	up to 60 MeV
JENDL High Energy File 2007, JENDL/HE-2007	106/1–95	up to 3 GeV
Joint Evaluated Fission and Fusion File, JEFF-3.1/A	774/1–100	up to 20 MeV
Medium Energy Nuclear Data Library, MENDL-2 [10]	505/13–84	up to 100 MeV
TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library, TENDL-2009	2375/6–110	up to 200 MeV
<b>The Intermediate Energy Activation File, IEAF-2005</b>	<b>682/1–84</b>	<b>up to 1 GeV</b>

FIGURE 3.3 – Liste non exhaustive de bibliothèques de données nucléaires notamment de hautes énergies ( $> 150$  MeV), tirée de (Korovin et al. 2010).

jectile incident (principalement proton) sont de deux types : les section indépendantes et les sections cumulatives. Les premières correspondent à la production directe de l'isotope donné, alors que les secondes prennent en compte les isotopes ascendants qui ont pu décroître sur l'isotope en question avant la mesure. Ainsi les résultats issus des calculs sont directement comparables aux sections indépendantes, mais pour ce qui est des sections cumulatives une certaine *sommation* doit être effectuée. Si l'on prend le cas simple d'un isotope ayant un parent, alors l'activité mesurée de cet isotope peut s'écrire :

$$A(t) = N_T \Phi \left[ \left( \sigma_F + \sigma_P \frac{\lambda_P}{\lambda_P - \lambda_F} \right) \left( 1 - e^{(-\lambda_F t_{irr})} \right) e^{(-\lambda_F t)} \right] - N_T \Phi \left[ \sigma_P \frac{\lambda_F}{\lambda_P - \lambda_F} \left( 1 - e^{(-\lambda_P t_{irr})} \right) e^{(-\lambda_P t)} \right], \quad (3.1)$$

où  $N_T$  est le nombre de noyau cible,  $\Phi$  le flux de projectiles,  $t_{irr}$  le temps d'irradiation,  $t$  le temps écoulé entre le début de l'irradiation et la mesure,  $\sigma$  les sections efficaces de production directes,  $\lambda$  les constantes de décroissance et les indices  $F$  et  $P$  renvoient à *Fils* et *Père*.

Si l'on définit la section efficace cumulative comme la section efficace apparaissant dans la formule donnant l'activité de l'isotope supposé sans parent, alors l'activité devrait d'écrire

$$A(t) = N_T \Phi \left[ \sigma_F^{cum} \left( 1 - e^{(-\lambda_F t_{irr})} \right) e^{(-\lambda_F t)} \right], \quad (3.2)$$

ce qui revient à définir la section cumulative comme

$$\sigma_F^{cum} = \sigma_F + \sigma_P \frac{\lambda_P}{\lambda_P - \lambda_F}. \quad (3.3)$$

Ceci n'est possible que dans les cas où la période de décroissance du père est grande devant celle du fils ( $\lambda_P \gg \lambda_F$ ). Cependant, les sections efficaces publiées ne le sont que très rarement avec la méthode utilisée pour les extraire à partir des activités et, lorsque c'est le cas, il reste le plus souvent la question de la transcription pratique :  $\lambda_P \gg \lambda_F$ . Aussi, après des discussions avec les deux principaux *fournisseurs* de sections efficaces cumulatives, R. Michel (Université de Hanovre) et Y. Titarenko (ITEP, Russie), j'ai décidé d'avoir un outil polyvalent. La condition  $\lambda_P \gg \lambda_F$  affecte les chaînes de décroissance que l'on doit prendre en compte, puisque l'équation 3.3 est itérative. Trois bibliothèques pour trois valeurs du rapport  $\frac{\lambda_P}{\lambda_F}$  (10, 3,33 et 2) ont été construites, ainsi qu'une bibliothèque

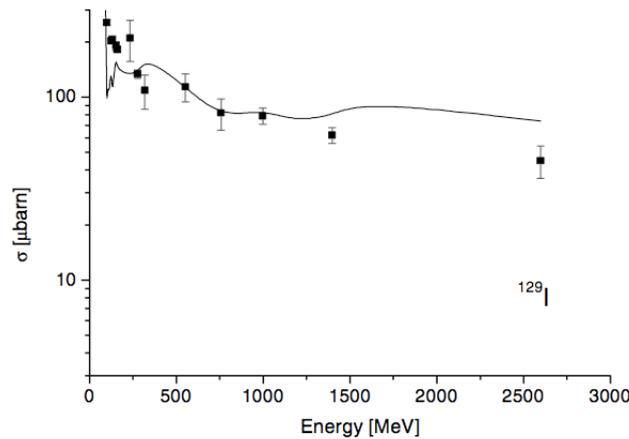


FIGURE 3.4 – Sections efficaces mesurées (carrés) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne) pour la production de  $^{129}\text{I}$  par irradiation de bismuth avec des protons. Figure tirée de (Schumann et al. 2011).

où aucune condition n'était imposée, mais où la section cumulative prend alors la simple forme d'une somme des sections directes. C'est le cas des données de Y. Titarenko qui considère celles de R. Michel comme supra-cumulatives du fait du terme multiplicatif  $\frac{\lambda_P}{\lambda_P - \lambda_F}$ . Ces bibliothèques ont été créées à partir de la bibliothèque DCHAIN-SP (Takada et Kosako 1999) contenant toutes les données de périodes et de rapports de branchement nécessaires. Si l'expérience a montré que les différences entre les différentes méthodes n'étaient la plupart du temps pas très importantes, on garde en sortie tous les résultats pour permettre une analyse plus fine. Ainsi, par exemple, la figure 2.38, page 89, du chapitre précédent, montre clairement la nécessité d'utiliser la méthode idoine suivant les données mesurées.

Les calculs faits pour la production d'isotopes en fonction de l'énergie incidente sur des cibles de plomb et de bismuth ont été publiés avec les mesures expérimentales dans cinq articles (Leya et al. 2005; 2006; 2008, Schumann et al. 2006; 2011). Les trois premiers cités concernent la production de gaz rares et les deux autres la production d'isotopes à vie longue. Ces calculs avaient été faits avec la version INCL4.2-Abla. Les résultats concernant les produits de fission notamment étaient plutôt satisfaisants, mais certains isotopes étaient clairement mal produits. La figure 3.4 donne un exemple de noyau correctement calculé par INCL4.2-Abla et les figures 3.5 et 3.6 des exemples où des efforts restaient clairement à faire (les grandes différences purement statistiques entre Pb et Bi en sont une preuve). D'ailleurs les conclusions de ses articles étaient en particuliers que les modèles n'étaient pas encore assez performants pour se passer de mesures expérimentales.

Après que les versions INCL4.5 et Abla07 aient été mises aux points et testées notamment à travers le *benchmark* organisée sous l'égide de l'AIEA (voir section 2.2), il est devenu intéressant de refaire les calculs sur le plomb<sup>2</sup>. Ainsi les figures 3.7 et 3.8 donnent de nouveaux résultats comparés à l'ancienne version et aux données. Les améliorations apportées aux codes sont nettes. Ceci est entre autre dû à une meilleure prise en compte de la production des noyaux dits de masse

2. D'aucuns diront qu'ils avaient été faits justement lors de ce *benchmark* AIEA pour le plomb. C'est vrai. Cependant, comme très souvent, les calculs n'ont été faits que pour un nombre réduit d'énergies incidentes et, comme mentionné précédemment, la façon de calculer les cumulatifs a évolué après des discussions notamment pendant et à l'issue de ce *benchmark*

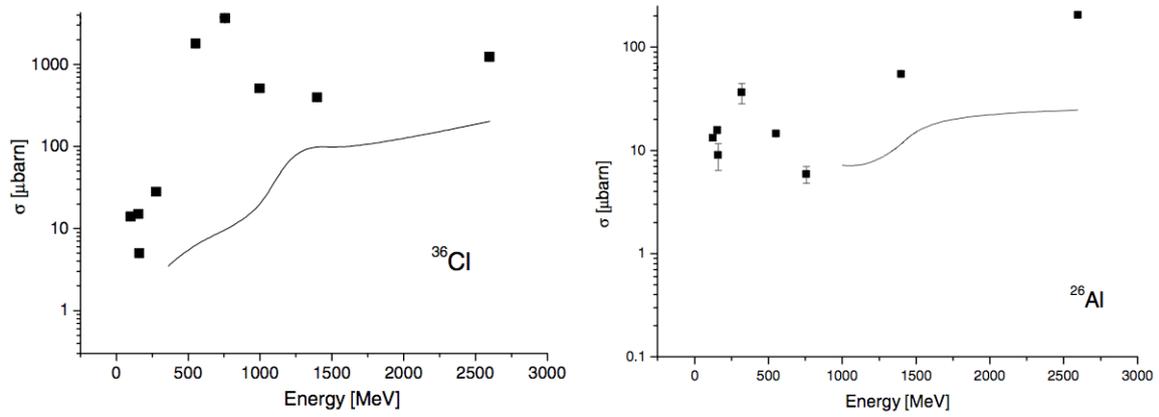


FIGURE 3.5 – Sections efficaces mesurées (carrés) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne) pour la production de  $^{36}\text{Cl}$  (gauche) et  $^{26}\text{Al}$  (droite) par irradiation de bismuth avec des protons. Figure tirée de (Schumann et al. 2011).

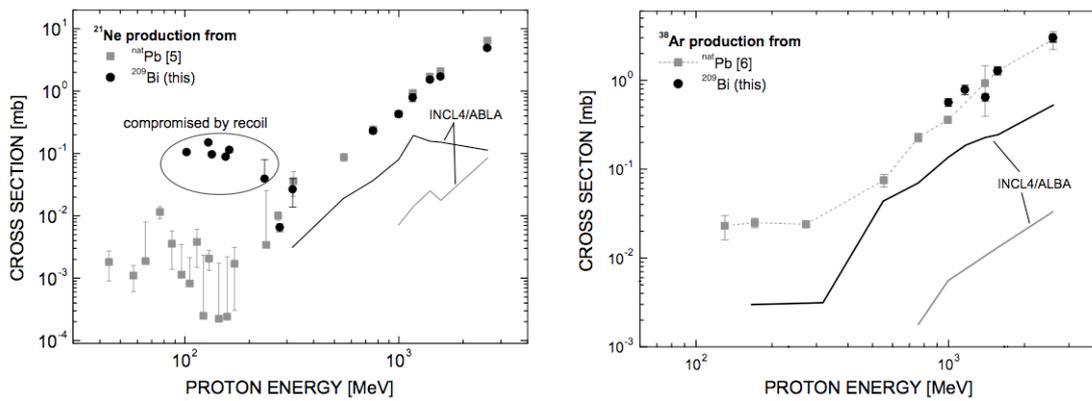


FIGURE 3.6 – Sections efficaces mesurées (carrés pour les cibles de plomb et ronds pour les cibles de bismuth) et calculées par INCL4.2-Abla (ligne grise pour le plomb et noire pour le bismuth) pour la production de  $^{21}\text{Ne}$  (gauche) et  $^{38}\text{Ar}$  (droite) par irradiation avec des protons. Figure tirée de (Leya et al. 2008).

intermédiaires discutées dans la section 1.4.1 page 38. On peut noter encore une difficulté à plus basse énergie à reproduire les données expérimentales. Est-ce un mécanisme qui démarre un peu tardivement ou un mécanisme qui n'est pas encore pris en compte ?

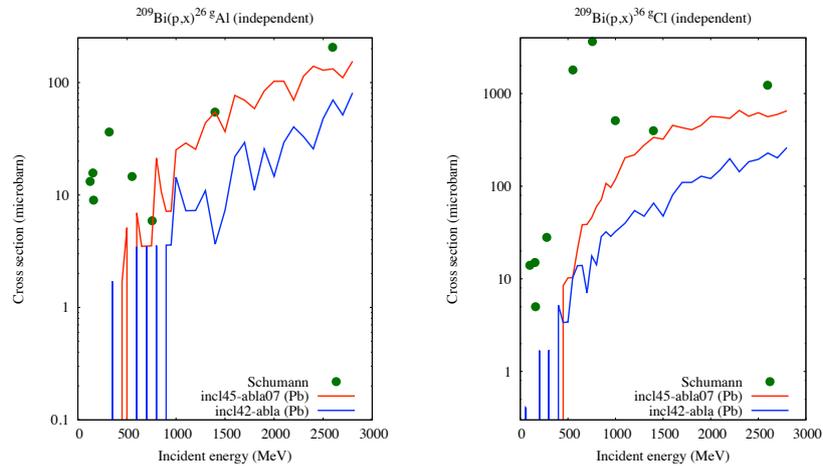


FIGURE 3.7 – Sections efficaces mesurées (rond) et calculées par INCL4.2-Abla et INCL4.5-Abla07 pour la production de  $^{26}\text{Al}$  (gauche) et  $^{36}\text{Cl}$  (droite) par irradiation d'une cible de bismuth avec des protons. Les calculs ont été faits avec une cible de plomb.

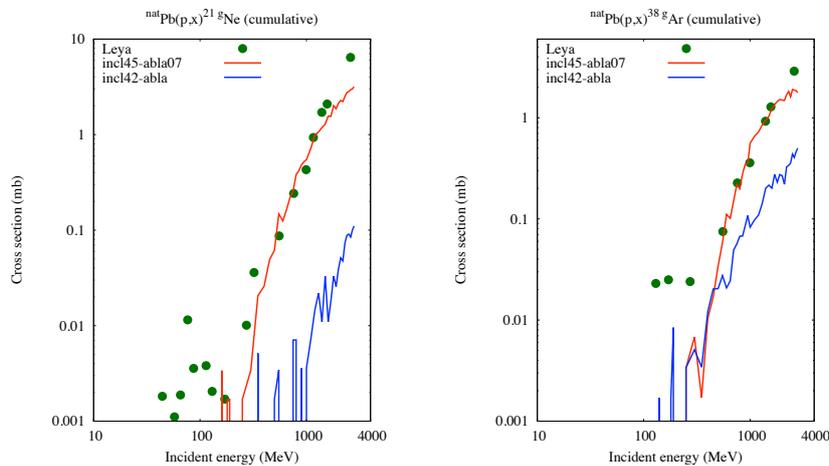


FIGURE 3.8 – Sections efficaces mesurées (rond) et calculées par INCL4.2-Abla et INCL4.5-Abla07 pour la production de  $^{21}\text{Ne}$  (gauche) et  $^{38}\text{Ar}$  (droite) par irradiation d'une cible de plomb avec des protons.

Les progrès faits dans la modélisation de la spallation montre que dans certains cas l'utilisation de modèle pour générer des bases de données est devenu acceptable. Un autre exemple sur le même type d'observable, mais dans une tout autre thématique, la cosmogénèse, est abordé ci-après.

### 3.1.3 Cosmogénie

Si les exemples de la section précédente portaient sur des noyaux de cibles de spallation du type ADS, donc des noyaux lourds comme le plomb et le bismuth, le même type d'information est aussi demandé pour les matériaux de structure, comme la fenêtre séparant l'accélérateur de la cible. Le matériau le plus souvent utilisé dans ce cas est le fer. Ce matériau a aussi un grand intérêt pour d'autres études, à savoir la production de noyaux cosmogéniques dans les météorites ferreuses. C'est dans ce cadre que je vais discuter des résultats des modèles de spallation sur le fer ou ses voisins en masse (David et al. 2011a).

La capacité à reproduire les quantités de noyaux formés dans les météorites du fait de leur irradiation par le rayonnement cosmique galactique (en anglais GCR pour *Galactic Cosmic Ray*) peut permettre de déterminer la taille de la météorite, son temps d'exposition au rayonnement, son temps éventuel de séjour sur terre, voire le flux du GCR. Les détails sur une telle étude se trouve dans la référence (Ammon et al. 2009). La formule donnant le taux de production  $P$  des noyaux cosmogéniques est

$$P_j(R, d, M) = \sum_{i=1}^N c_i \frac{N_A}{A_i} \sum_{k=1}^3 \int_0^{\infty} \sigma_{i,j,k}(E) J_k(E, R, d, M) dE, \quad (3.4)$$

où  $j$  est le noyau en question,  $R$  et  $d$  sont le rayon de la météorite et la profondeur où le taux est déterminé,  $M$  le paramètre de modulation solaire<sup>3</sup>,  $i$  est un élément cible,  $c_i$  sa concentration et  $A_i$  son nombre de masse,  $N_A$  la constante d'Avogadro,  $k$  est le type de particule induisant la réaction (proton primaire et secondaire et neutron secondaire),  $\sigma_{i,j,k}(E)$  la section efficace de production de l'isotope  $j$  par interaction de la particule  $k$  avec la cible  $i$  et à une énergie incidente  $E$ , et enfin  $J_k(E, R, d, M)$  est la densité de flux de la particule  $k$ .

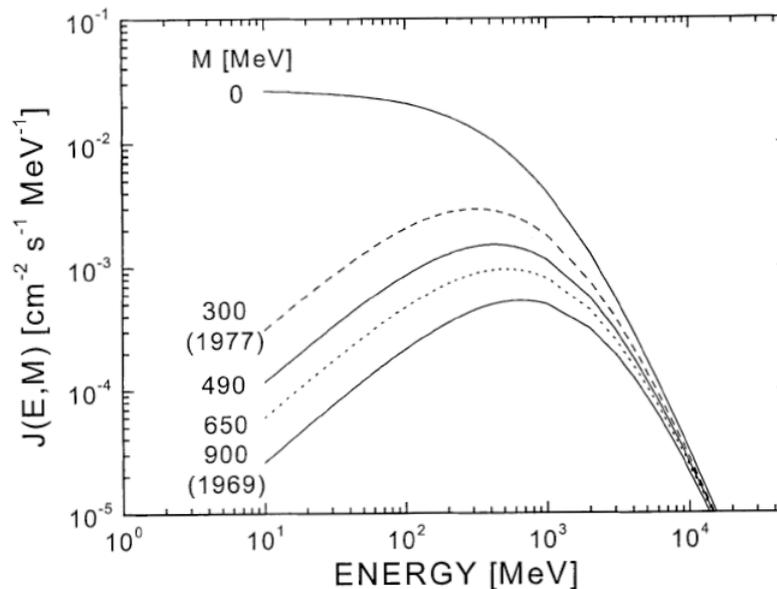


FIGURE 3.9 – Spectres en énergie des protons GCR à 1 UA. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs pour le paramètre de modulation solaire  $M$ . Cette figure est tirée de (Leya et al. 2001).

3. Perte d'énergie par distance héliocentrique d'une particule entrant dans le système solaire

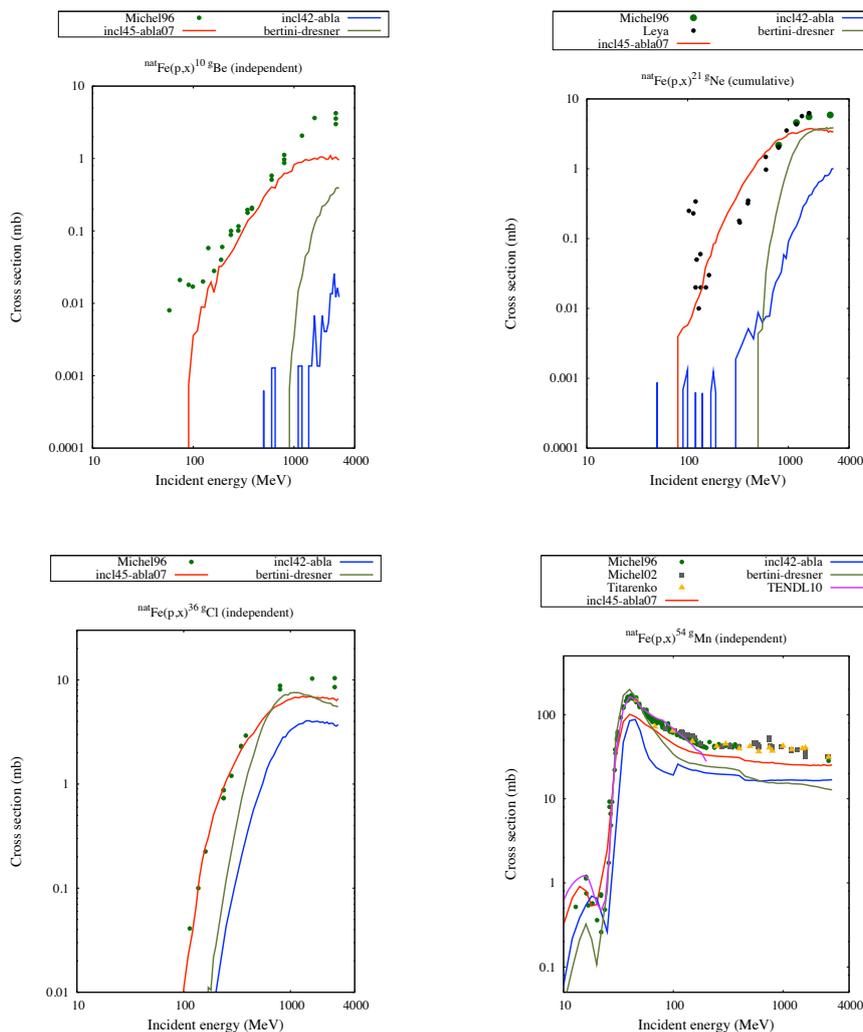


FIGURE 3.10 – Sections efficaces de production sur le fer de  $^{10}\text{Be}$  (en haut à gauche), de  $^{21}\text{Ne}$  (en haut à droite), de  $^{36}\text{Cl}$  (en bas à gauche) et de  $^{54}\text{Mn}$  (en bas à droite) en fonction de l'énergie du proton incident. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla (bleu), INCL4.5-Abla07 (rouge), Bertini-Dresner (kaki) et TALYS (bibliothèque TENDL10) (violet).

Ce sont bien sûr les sections efficaces  $\sigma_{i,j,k}(E)$  que l'on peut produire par les modèles des spallation, car le spectre GCR (figure 3.9) correspond assez bien à celui couvert par la spallation. Dans ce qui suit je m'attache à voir les améliorations apporter par les nouvelles versions d'INCL4.6 et Abla07 dans le cas du fer (et/ou du nickel), à aborder le problème des productions par les neutrons ainsi que par les  $\alpha$ , car le spectre GCR est composé à 87% de protons, 12% d' $\alpha$  et 1% d'ions plus lourds.

Une des conclusions de l'étude (Ammon et al. 2009) était là encore que les modèles de spallation ne donnaient pas les résultats escomptés. Comme pour le cas du plomb j'ai refait les calculs dans le cas des cibles de fer en me focalisant un peu plus sur les isotopes intéressants pour la cosmogénèse. La figure 3.10 donnent les résultats obtenus pour quatre isotopes couvrant le spectre des masses avec trois voire quatre modèles différents. En plus de nos deux modèles INCL4.2-Abla et

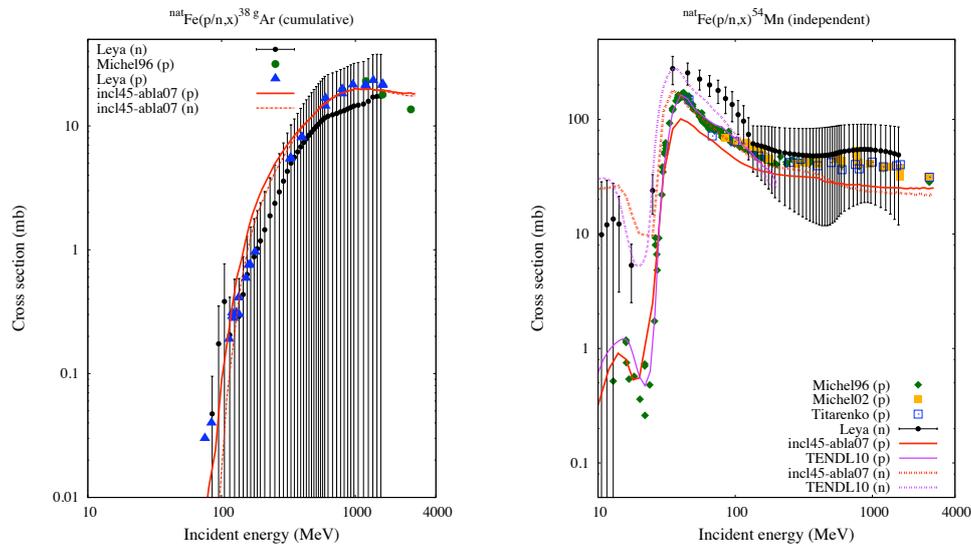


FIGURE 3.11 – Sections efficaces de production sur le fer de  $^{38}\text{Ar}$  (à gauche) et de  $^{54}\text{Mn}$  (à droite) en fonction de l'énergie du proton ou du neutron incident. Les calculs sont faits avec INCL4.5-Abla07 (rouge) et TALYS (bibliothèque TENDL10) (violet). Les traits pleins concernent les protons et les traits tiretés les neutrons.

INCL4.5-Abla07 tracés pour voir les améliorations apportées par la nouvelle version, j'ai mis les résultats du modèle par défaut de MCNPX, Bertini-Dresner, ainsi que les résultats du code TALYS fournis dans la bibliothèque TENDL10 (Koning et Rochman 2010). Le domaine de validité de ce code TALYS est, pour rappel, entre le domaine des résonances et 150-200 MeV. Ces deux derniers codes, et notamment TALYS, sont parfois utilisés pour palier le manque de données expérimentales nécessaires à la cosmogénie.

La première observation est le progrès important fait par la nouvelle version INCL4.5-Abla07. Si l'on peut voir des sujets de futures améliorations, la comparaison aux données expérimentales montre que maintenant la question d'utiliser un tel modèle de spallation pour ce genre d'étude est redevenue d'actualité. De plus la comparaison avec le code TALYS montre là encore (comme sur la figure 3.1, page 93) que notre combinaison de code est valide même aux énergies censées *très* basses (sous 200 MeV).

En ce qui concerne la contribution des neutrons la situation est bien plus compliquée que pour les protons, car les données sont rares et très souvent de mauvaise qualité. Pour palier cela il est parfois fait l'approximation de considérer les neutrons comme des protons pour les sections efficaces de production d'isotopes. Cette approximation a déjà été montrée pas toujours vérifiée (Leya et Masarik 2009), mais avec la figure 3.11 j'ai voulu justement comparer les sections efficaces proton et neutron entre elles et aux données qui existent. Dans le cas du neutron des données récentes ont été obtenues par déconvolution à partir de mesures sur des cibles épaisses. Les détails sur ces données sont dans la référence (Leya et Michel 2011). On voit la grande difficulté à obtenir ces données pour les neutrons. Il faut noter que la technique utilisée pour les obtenir est basée sur une fonction de base (*guess function*) principalement tirée du code TALYS. Ceci explique que les erreurs de-

viennent importantes au-delà de 150 MeV. Pour des énergies de projectile incident élevées les sections efficaces proton et neutron sont assez semblables. Ainsi pour l' $^{38}\text{Ar}$  qui nécessitent des énergies supérieures à environ 100 MeV les deux types de sections efficaces sont comparables et l'on peut prendre l'une pour l'autre. Les codes donnent d'ailleurs des résultats très corrects. Dans le cas du  $^{54}\text{Mn}$  le situation est différente. Si les codes continuent à être valables sur toute la gamme en énergie, c'est à dire dès 10 MeV, on voit nettement la différenciation entre les protons et les neutrons pour les énergies inférieures à environ 150 MeV, que ce soit par les données expérimentales que par les codes. De cela il ressort que les sections efficaces avec des neutrons peuvent être assimilées à celles des protons qu'à partir d'une énergie seuil de l'ordre de 100 MeV, et qu'en deçà il est nécessaire de faire confiance aux codes de calcul, à moins que des données existent. Malheureusement ces dernières sont rares et souvent obtenues de manière indirecte induisant des incertitudes importantes.

Comme il a été dit, le GCR est composé à 12% d' $\alpha$  et comme pour les autres particules les  $\alpha$  peuvent aussi être issus des réactions. Les données de sections efficaces avec les  $\alpha$  étant aussi rares et, comme peu de modèles étaient capables de les prendre en compte, une des solutions était de considérer que l' $\alpha$  se brisait en deux protons et deux neutrons, chacun portant 25% de l'énergie. Ceci revenait au final à ne considérer que les protons et neutrons et à affecter un facteur multiplicatif de 1,55 aux taux de production obtenus pour tenir compte des 12% d' $\alpha$ . Si cette approximation peut donner des résultats corrects à haute énergie, le cas des isotopes produits par des  $\alpha$  de basses énergies pose évidemment problème (Ammon et al. 2009). Les particules composites comme projectiles étaient déjà possibles dans la version INCL4.2, mais un certain nombre d'effets n'avaient pas été étudiés et pris en compte, comme la déviation coulombienne ou le traitement à basse énergie. Dans la version INCL4.5 des améliorations ont été apportées et d'autres encore dans la version 4.6. Les résultats, figure 3.12, sont très nettement meilleurs que ceux donnés par l'approximation (2 protons - 2 neutrons), même si le modèle INCL4.6 souffre encore de défauts à corriger pour certains isotopes.

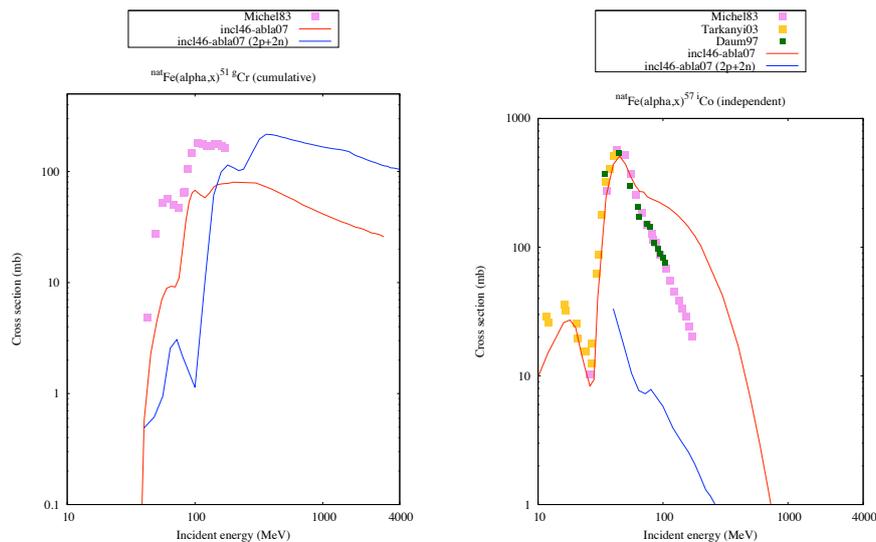


FIGURE 3.12 – Sections efficaces de production de  $^{51}\text{Cr}$  (à gauche) et de  $^{57}\text{Co}$  (à droite) en fonction de l'énergie de l' $\alpha$  incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (rouge). Les résultats tirés de l'approximation de la brisure de l' $\alpha$  en deux protons et deux neutrons sont donnés par INCL4.6-Abla07 (bleu).

## 3.2 SIMULATION - CONCEPTION

L'utilisation la plus courante des codes de spallation concerne les simulations des cibles de spallation utilisées dans des installations ou plus précisément la conception de ces cibles. J'aborde ci-dessous trois projets pour lesquels nous avons travaillé et d'où ressortent à la fois l'apport des modèles de spallation implantés dans les codes de transport, l'intérêt de rendre les modèles les plus fiables possibles dans un domaine de validité élargi et le retour d'expérience de ces simulations pour les voies d'amélioration des modèles.

### 3.2.1 Eurisol

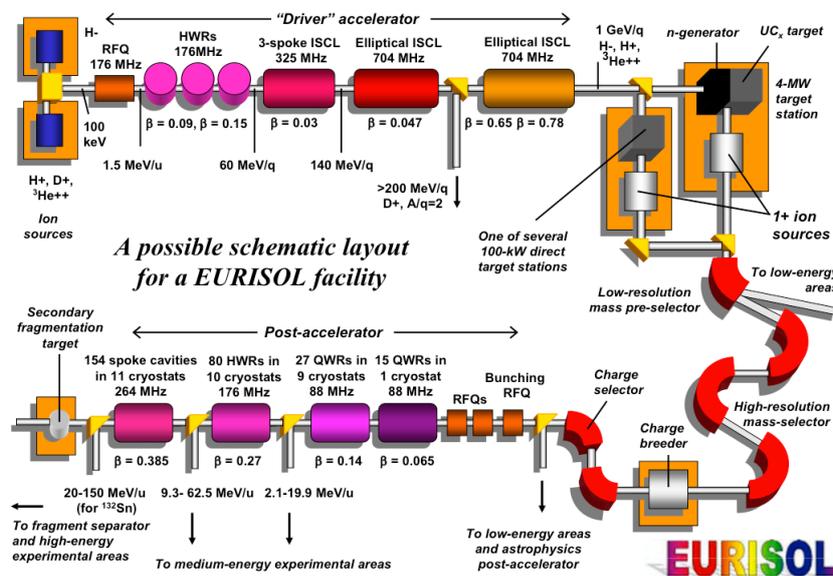


FIGURE 3.13 – Vue schématique de l'installation EURISOL envisagée. Figure tirée de (Cornell et al. 2009).

Le projet EURISOL est un projet européen de faisceaux d'ions radioactifs exotiques utilisant la méthode ISOL (*Isotope Separation On-Line*). Le but est qu'il succède à des installations du même genre qui devraient être mises en fonctionnement prochainement, comme SPIRAL2 au GANIL et HIE-ISOLDE au CERN, et qu'il délivre ces ions radioactifs avec des intensités de plusieurs ordres de grandeurs plus élevés. Un projet complémentaire en construction en Allemagne, FAIR (*Facility for Antiprotons and Ions Research*), utilise lui la méthode de séparation en vol. Ce dernier utilise comme faisceau primaire des ions lourds, alors que le projet EURISOL utilise des particules, comme le proton, qui produisent ces ions radioactifs exotiques soit directement dans une cible par réaction de spallation, soit par fission d'actinides via des neutrons issus de réaction de spallation dans un convertisseur. La figure 3.13 donne un schéma de l'installation EURISOL telle qu'elle pourrait être et montre en particuliers les deux types de cibles en haut à droite : plusieurs cibles directes qui auront une puissance d'environ 100 kW et une cible de fission de 4 MW. Si le faisceau primaire devrait surtout être des protons de l'ordre du GeV, la possibilité d'utiliser des deutons ou  $^3\text{He}$  n'est pas exclue.

De 2005 à 2009 nous avons été impliqué dans le projet EURISOL-DS (*Eurisol Design Study*) pour des calculs liés à la sûreté et pour l'estimation des rendements

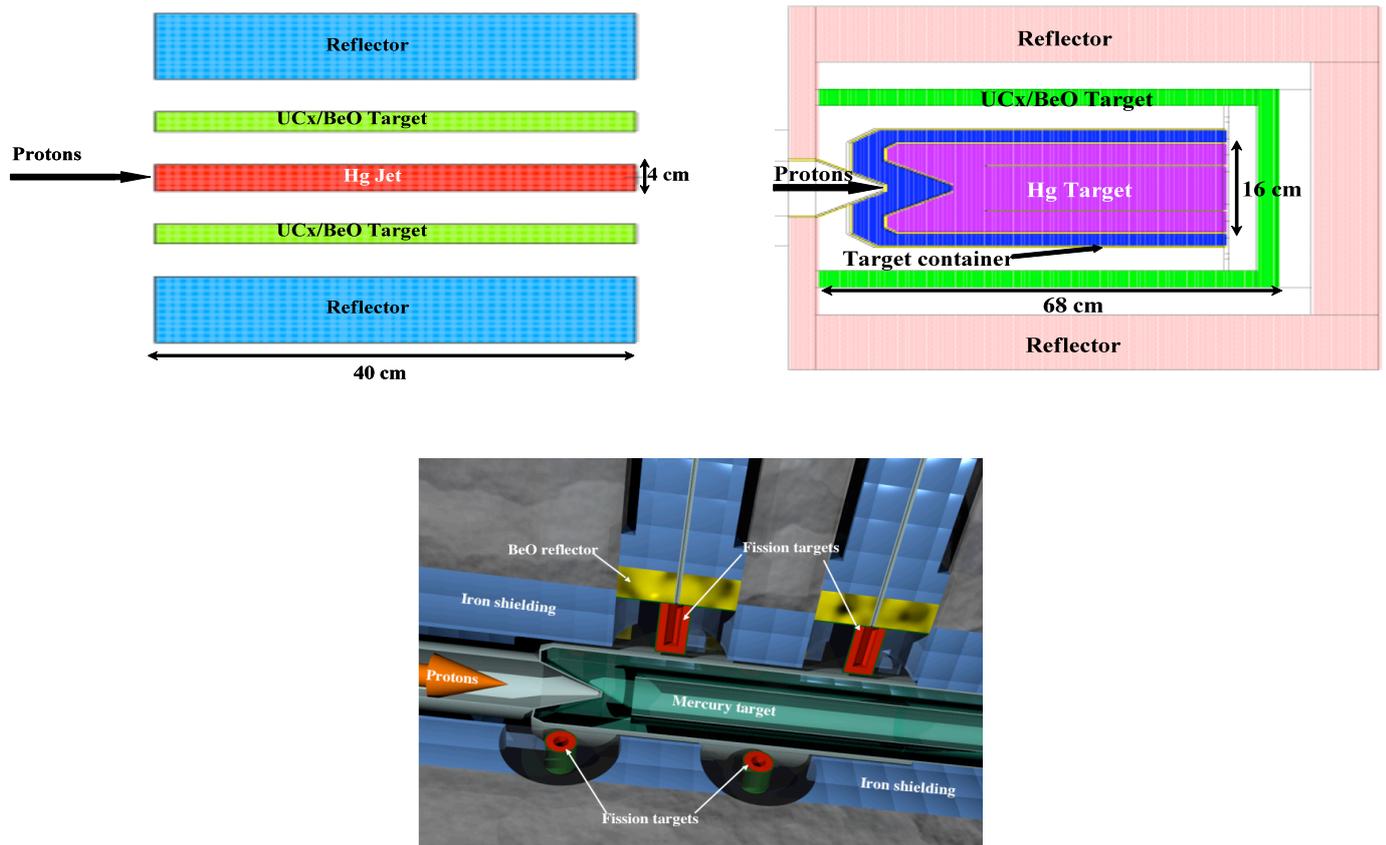


FIGURE 3.14 – Les différentes géométries de la cible de fission (cible de mercure entourée des cibles d'actinides), chronologiquement de gauche à droite et de haut en bas. Figure tirée de (Cornell et al. (2009), p. 47 et 62).

en cible des ions radioactifs produits. Dans les deux cas le travail consistait à simuler les cibles pour obtenir les noyaux produits. Pour la sûreté les flux de particules, principalement les neutrons, était bien sûr aussi importants. Puisque la cible de fission de 4MW était le problème délicat de la sûreté, entre autres du point de vue de la radioactivité, et que la production des ions radioactifs par spallation se faisait dans les cibles directes, ce sont donc ces deux sujets que je vais aborder ici pour illustrer l'apport de nos modèles à la simulation d'une telle installation.

Le concept de cible de fission est un concept en deux étapes. Il y a d'abord une cible de noyaux lourds (ici le mercure), bombardée par les protons incidents, qui sert de convertisseur en fournissant des neutrons de spallation, puis, il y a des cibles d'actinides, entourant ce convertisseur et sièges de fissions par les neutrons, produisant ainsi des ions radioactifs. La figure 3.14 montre l'évolution du type de géométries proposées par les responsables de la conception. Ce genre de cible doit satisfaire bien entendu de nombreuses contraintes qui ne sont pas seulement radiologiques, mais aussi thermiques, mécaniques, chimiques, etc.

La figure 3.15 donne l'activité totale de la cible de mercure au moment de l'arrêt de l'irradiation et en fonction du temps de refroidissement. Les estimations ont été faites par trois modèles de spallation, Isabel-Abla, CEM2k et INCL4.2-Abla, disponibles dans le code de transport MCNPX2.5.0, chacun suivi du code d'évolution CINDER'90. Le premier point est la très forte activité générée. Elle est comparable à celle d'un réacteur de recherche de 20 MW (Moormann 2003, Moormann et al. 2008) et en fonction du temps peut devenir supérieure du fait

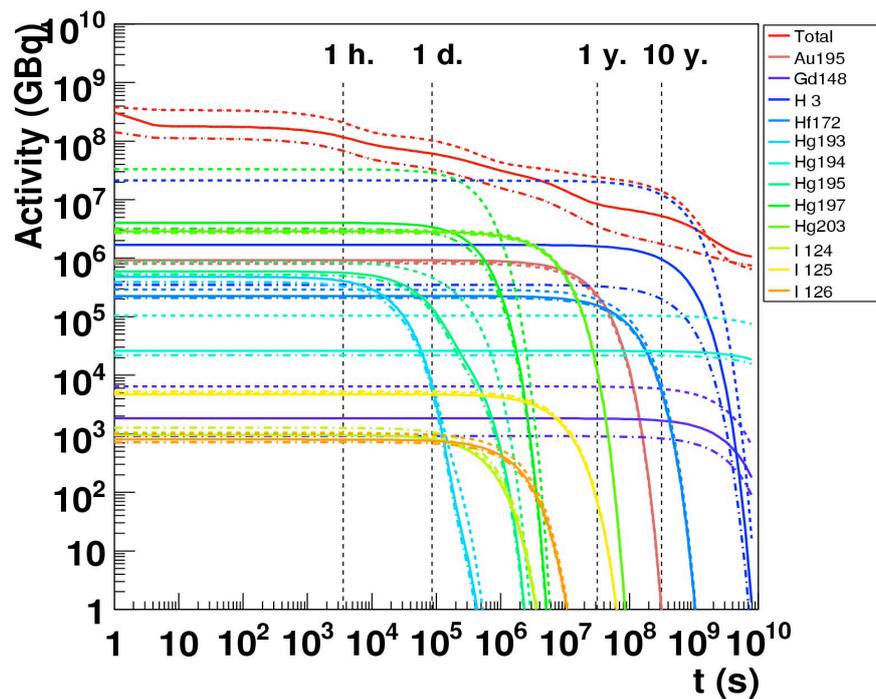


FIGURE 3.15 – Estimations des activités (totales et des principaux contributeurs) dans la cible de mercure en fonction du temps de refroidissement et après une irradiation de 40 ans en continu avec des protons de 1 GeV et une intensité de 2.28 mA. Les calculs ont été faits avec trois modèles de spallation différents disponibles dans MCNPX2.5.0 et un code d'évolution, CINDER'90. Les trois modèles sont Isabel-Abla (ligne pleine), CEM2k (ligne tiretée) et INCL4.2-Abla (ligne tiretée-pointillée). Figure tiré de (Rapp et al. 2010).

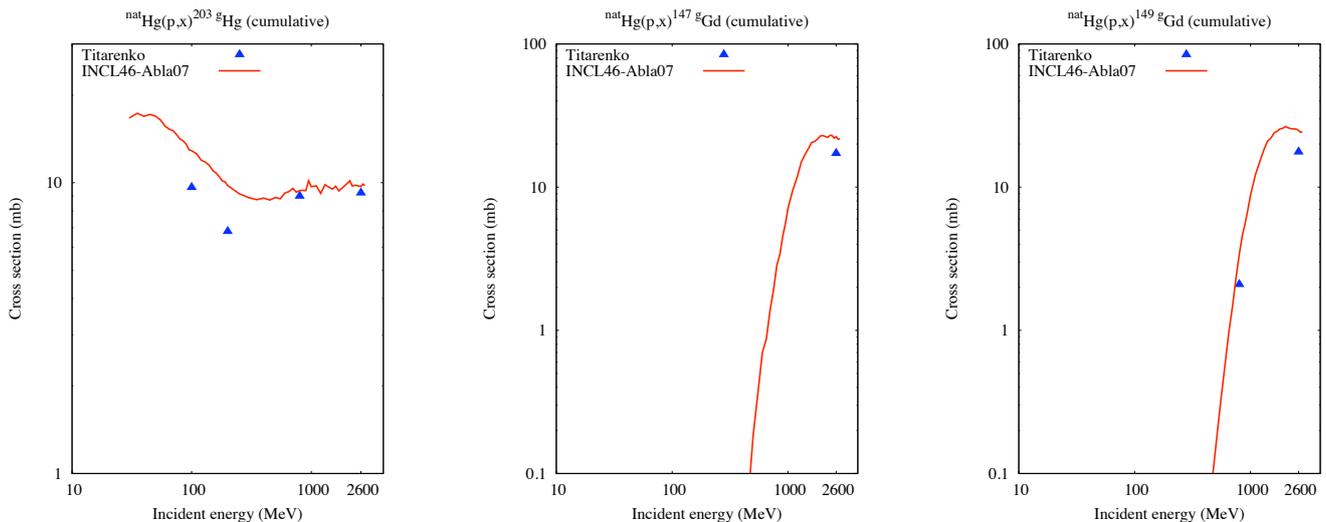


FIGURE 3.16 – Sections efficaces de production du  $^{203}\text{Hg}$  (gauche), du  $^{147}\text{Gd}$  (milieu) et du  $^{149}\text{Gd}$  (droite) en fonction de l'énergie du proton incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (ligne rouge).

	1 year after irradiation			10 years after irradiation		
	ISABEL-ABLA	CEM2k	INCL4-ABLA	ISABEL-ABLA	CEM2k	INCL4-ABLA
Total activity	8.410 <sup>6</sup>	2.4 10 <sup>7</sup>	3.5 10 <sup>6</sup>	5.2 10 <sup>6</sup>	1.4 10 <sup>7</sup>	1.7 10 <sup>6</sup>
<sup>195</sup> Au	2.4 10 <sup>5</sup>	2.110 <sup>5</sup>	2.2 10 <sup>5</sup>	1.8	1.6	1.7
<sup>148</sup> Gd	1.810 <sup>3</sup>	6.4 10 <sup>3</sup>	9.0 10 <sup>2</sup>	1.710 <sup>3</sup>	5.910 <sup>3</sup>	8.3 10 <sup>2</sup>
<sup>3</sup> H	1.6 10 <sup>6</sup>	2.0 10 <sup>7</sup>	3.3 10 <sup>5</sup>	9.610 <sup>5</sup>	1.2 10 <sup>7</sup>	2.0 10 <sup>5</sup>
<sup>172</sup> Hf	1.610 <sup>5</sup>	2.010 <sup>5</sup>	1.5 10 <sup>5</sup>	5.610 <sup>3</sup>	7.110 <sup>3</sup>	5.2 10 <sup>3</sup>
<sup>194</sup> Hg	2.610 <sup>4</sup>	1.010 <sup>5</sup>	2.2 10 <sup>4</sup>	2.610 <sup>4</sup>	1.010 <sup>5</sup>	2.2 10 <sup>4</sup>

FIGURE 3.17 – Contributions à l'activité (en GBq) de quelques isotopes importants pour la radioprotection de la cible de mercure. Estimations fournies par trois modèles disponibles dans MCNPX2.5.0 : Isabel-Abla, CEM2k et INCL4.2-Abla . Tableau tiré de (Rapp et al. 2010).

de contributeurs spécifiques, comme par exemple vers 500-1000 ans où le <sup>194</sup>Hg (demi-vie de 444 ans) joue un rôle important. Le deuxième point est la différence entre les modèles. Si tous donnent le même ordre de grandeur pour l'activité totale, des facteurs quatre, voire dix autour de dix ans de refroidissement, apparaissent. Au début du refroidissement ce sont beaucoup les isotopes proches en masse A de la cible qui sont les contributeurs principaux. Il y a par exemple le <sup>203</sup>Hg. Pour analyser ce genre de résultat il aurait fallu au moment faire une étude des fonctions d'excitation sur le mercure, pour permettre de connaître le domaine en énergie où les différences existaient. En fait, récemment ce genre de calcul a été fait avec la version INCL4.6-Abla07 dans le cadre du projet ESS (section 3.2.3). Les données sont assez rares et ne permettent pas d'avoir une idée de l'évolution en fonction de l'énergie. Cependant, sur le graphe de gauche de la figure 3.16 on voit que si ce genre d'étude était refaite avec cette version de code (INCL4.6-Abla07) les résultats concernant le <sup>203</sup>Hg seraient assurément bien meilleurs qu'un facteur 2. Les différences vers dix ans sont dues au tritium. Ce sujet est développé dans la section suivante sur Megapie, aussi je ne mentionnerai que l'impossibilité d'Isabel, d'INCL4.2 et d'Abla à produire directement du tritium et la surestimation de celui-ci par CEM2k comme l'a montré B. Rapp avec la figure 5 de (Rapp et al. 2010). Le tableau de la figure 3.17 reprend des valeurs d'activité pour cinq radioisotopes et deux temps de refroidissement. Il permet notamment de mieux voir les différences entre les modèles pour un émetteur  $\alpha$ , le <sup>148</sup>Gd. Si l'activité totale est comparable aux réacteurs de recherche, des spécificités existent comme ces émetteurs  $\alpha$ , ce qui constituent le troisième point important en ce qui concerne la radioactivité de la cible de mercure. Les modèles utilisés ici étaient connus pour avoir des difficultés à reproduire correctement les noyaux résiduels issus d'une phase de désexcitation importante, ce qui est le cas du <sup>148</sup>Gd venant du mercure. Là encore on voit sur la figure 3.16 (graphes du milieu et de droite) que l'estimation de INCL4.6-Abla serait aujourd'hui correcte.

Que ce soit dans les cibles directes ou de fission les noyaux radioactifs produits sont ensuite extraits de la cible, ionisés et post-accélérés pour fournir le faisceau d'ions radioactifs. Nos calculs pour les cibles directes consistaient en l'estimation des rendements de production de sept noyaux d'intérêt dont la liste avait été donnée par NUPECC (Cornell 2003), Be, Ar, Ni, Ga, Kr, Sn et Fr, et auquel on a ajouté quatre nouveaux, Li, Ne, Mg et Hg . En lien avec les concepteurs des cibles directes, il avait été décidé de lancer un nombre suffisant, mais raisonnable,

Target material	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiC	Pb (molten)	Ta	UC <sub>3</sub>
$\rho$	2.0	3.2	11.4	12.5	2.418
$L$	50-75-100-125	32-48-64-80	9-18-27-36	8-16-24-32	40-60-80-100
$R$	9.0-12.7-18.0-25.5				
$\sigma$	$R/3$				
Beam particles	protons				
$E$	0.5-1.0-1.5-2.0				
$P$	100				

FIGURE 3.18 – Paramètres utilisés pour le calcul de rendements de production en cible des noyaux dans le cas des cibles directes. La densité  $\rho$  est en  $g.cm^{-3}$ , la longueur  $L$  en cm, le rayon  $R$  et la largeur à mi-hauteur  $\sigma$  de l'extension du faisceau en mm, l'énergie  $E$  en GeV et la puissance  $P$  en kW. Ce tableau est tirée de (Chabod et al. 2010).

de calculs dont les paramètres couvraient un spectre assez large pour y trouver les optima. Ces paramètres sont regroupés dans le tableau de la figure 3.18. Le choix des différents matériaux avait pour but d'optimiser les plages en charge et masse des noyaux produits. Si la géométrie retenue était un cylindre, quatre longueurs et quatre rayons différents étaient calculés, le but étant là aussi de chercher à optimiser le rendement, avec un équilibre à trouver entre une cible volumineuse où le maximum de noyaux est produit, mais où les pertes par extraction sont importantes et le cas opposé d'une petite cible. Nous nous sommes restreints dans cette étude au faisceau de proton en le déclinant toutefois sous quatre énergies, son intensité étant réglée par la puissance délivrée choisie constante et égale à 100 kW. Les codes utilisés ont été INCL4.2-Abla et CEM2k. Ce choix a été dicté par plusieurs contraintes : i) la possibilité de comparer différentes simulations, ii) la qualité des modèles utilisés étudiée dans (David et al. 2007a;b), et iii) les temps de calculs, car l'ensemble des configurations correspond à 320 calculs par modèle.

La stratégie pour déterminer les configurations optimales a consisté à avancer pas à pas, critère par critère. Le premier est le matériau de la cible suivant l'isotope donné, le deuxième l'énergie des protons incidents et le troisième les dimensions, longueur et rayon, de la cible. Les graphes utilisés pour le choix des matériaux sont les distributions en charge et masse des noyaux produits. La figure 3.19 en donne un exemple. Les conclusions de cette étude sont résumées dans le tableau de la figure 3.20. Il arrive que plusieurs matériaux soient de bons candidats pour une charge ou une masse donnée, dans ce cas les A et Z n'ont pas été reportées dans le tableau. L'optimisation sur l'énergie du faisceau est basée sur le fait qu'il vaut mieux augmenter l'intensité que l'énergie financièrement parlant, en dehors de tout problème technique. Ceci nous a amené à étudier les rendements par unité d'énergie incidente. La figure 3.21 montre un exemple dans le cas du <sup>7</sup>Be. Si en absolu plus l'énergie est élevée, plus le rendement l'est, par unité d'énergie on voit que ce sont les faisceaux de 0,5 GeV qui sont les plus efficaces. Enfin le choix de la géométrie s'est faite à partir de graphes donnant les taux de production à la fois en fonction de la longueur et du rayon de la cible. Deux exemples sont données sur la figure 3.22. On voit sur cette figure que dans un cas le gain se fait surtout par l'accroissement du rayon (<sup>92</sup>Kr), alors que dans l'autre c'est par l'accroissement de la longueur (<sup>180</sup>Hg). Une explication possible à cette différence est le mode de production. Le <sup>92</sup>Kr obtenu par l'UC<sub>3</sub> se fait aisément par fission, c'est à dire que les particules secondaires (distribuées dans tout le volume) peuvent aussi induire cette fission, alors que le <sup>180</sup>Hg venant du Pb nécessite une forte énergie incidente et donc sa création suit préférentiellement l'axe du faisceau primaire.

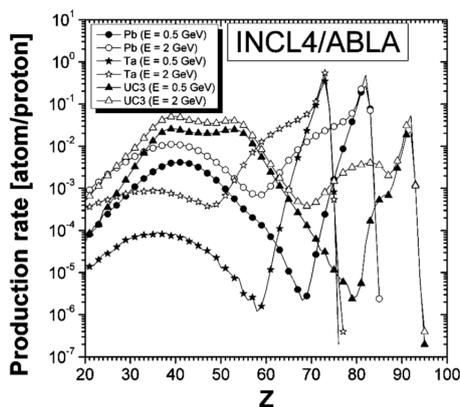


FIGURE 3.19 – Distributions en charge des taux de production de noyaux par proton incident. Les différentes cibles ont été choisies de masses comparables et le modèle utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2010).

Z	Best material	A	Best material
$\sim 7$	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	$\sim 15$	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
$\sim 15$	SiC	$\sim 30$	SiC
$30 \leq Z \leq 55$	UC <sub>3</sub>	$160 \leq A \leq 180$	Ta
$65 \leq Z \leq 70$	Ta	$185 \leq A \leq 210$	Pb
$75 \leq Z \leq 80$	Pb	$\geq 215$	UC <sub>3</sub>
$\geq 85$	UC <sub>3</sub>		

FIGURE 3.20 – Matériaux optimaux pour la production en cible de noyaux radioactifs. Les caractéristiques géométriques prises en compte pour cette étude étaient : Rayon R=18mm, masse = 2kg. Ce tableau est tiré de (Chabod et al. 2010).

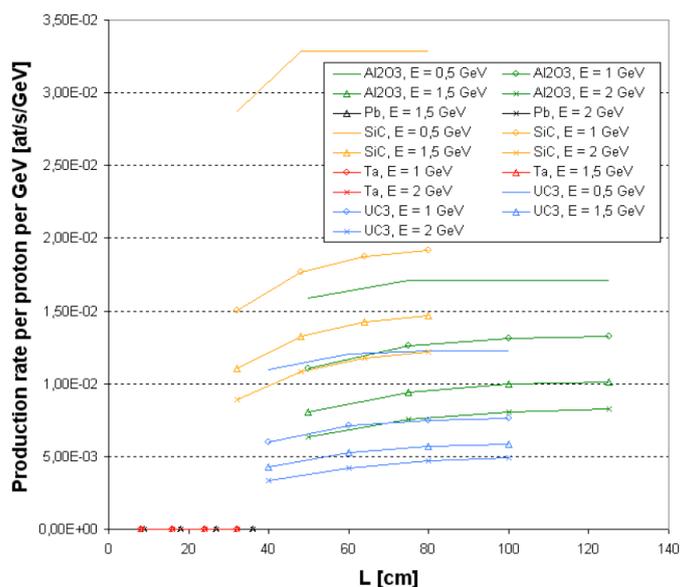


FIGURE 3.21 – Taux de production par proton incident et par GeV de <sup>7</sup>Be, obtenus par différentes énergies de faisceaux de protons sur différentes cibles (R = 18 mm). Le code utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2008).

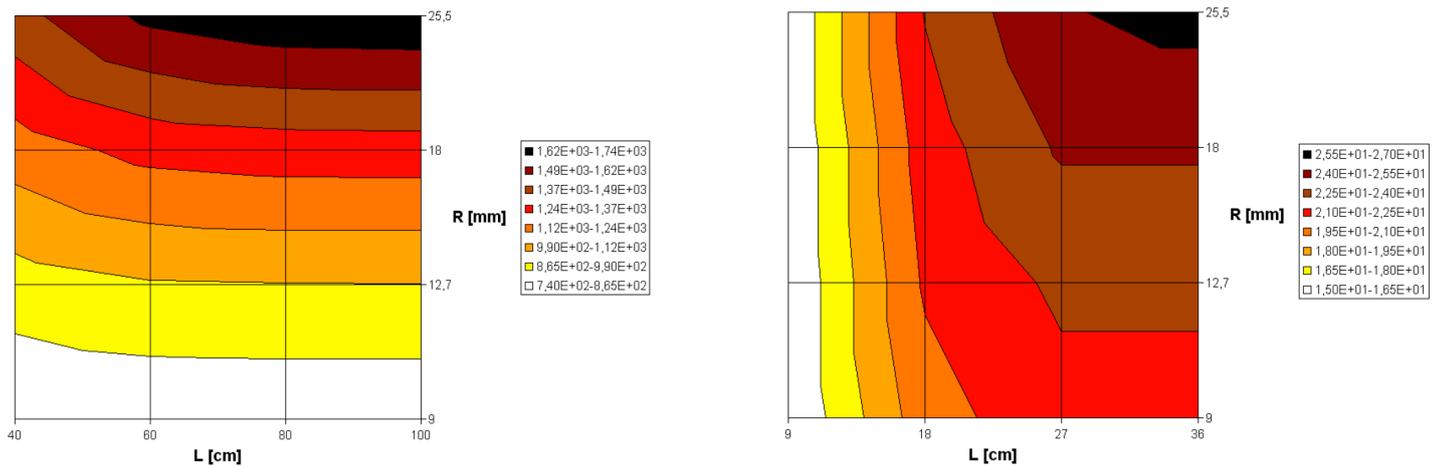


FIGURE 3.22 – Taux de production de  $^{92}\text{Kr}$ , obtenus par un faisceau de protons de  $0,5\text{ GeV}$  et une cible de  $\text{UC}_3$  (gauche), et de  $^{180}\text{Hg}$ , obtenus par un faisceau de protons de  $1\text{ GeV}$  et une cible de  $\text{Pb}$  (droite), par proton incident ( $10^{-6}\text{ s}^{-1}$ ) en fonction du rayon  $R$  et de la longueur  $L$  de la cible. Le code utilisé est INCL4.2-Abla. Cette figure est tirée de (Chabod et al. 2008).

Cette démarche a permis d'aboutir à un tableau final, fig. 3.23, donnant pour chaque isotope d'intérêt la ou les meilleures configurations d'après le modèle utilisé et la valeur maximale du rendement. Parfois la statistique n'était pas assez importante pour tirer des conclusions fortes, parfois c'était la qualité du modèle pour l'isotope et la cible considérés, parfois les données expérimentales ne permettaient pas de juger de la validité des modèles, c'est pourquoi dans ce tableau des remarques ont été ajoutées. Le but de ces remarques étaient de pointer les cas délicats et ainsi de permettre, lors du futur design détaillé des cibles d'EURISOL, d'y attacher plus d'importance. Si nous avons en tête le problème de l'extraction lorsque l'on cherchait à optimiser les cibles pour obtenir les meilleurs rendements, il faut garder à l'esprit que le calcul des efficacités d'extraction est une étude en soi et très complexe. Ces efficacités peuvent valoir de quelques pourcents à quelques centièmes de pourcent et réduire ainsi considérablement les rendements effectifs de production (Kelic 2009). Ceci est important à prendre en compte lorsque deux options sont possibles, comme notamment les produits de fission que l'on peut obtenir par les cibles directes et la cible de fission.

Ces études dans le cadre du projet EURISOL-DS avaient pour but, tant pour la sûreté que pour l'estimation des rendements de production, de fournir la meilleure information disponible au moment. Cette information concernait bien sûr des valeurs sur lesquelles s'appuyer, comme les activités, les doses, les dimensions de blindage, les taux de production des noyaux, pour pouvoir juger de la faisabilité d'un tel projet, mais aussi la démarche à utiliser pour les études ultérieures et les points sensibles sur lesquels une attention particulière devra être portée et où certains développements auront peut-être apporté une réponse. Sur ce dernier point on peut notamment citer les améliorations des codes de spallation depuis cette étude, avec, entre autres pour INCL et Abla, une extension à basse énergie permettant une fiabilité accrue dans les codes de transport, des particules légères chargées (ex. : tritium,  $^3\text{He}$ ) produites correctement. Deux sujets abordés dans la section suivante.

**Table 3.** In-target maximal nuclei yields (atom/s) expected within EURISOL single-stage targets for 1 GeV protons. Proton beam energy = 1 GeV, beam power = 100 kW, spallation models = INCL4/ABLA and CEM2k, target radii = 18 mm, low energetic secondary neutron flux contribution taken into account, CINDER evolution time = 1 ms. Note that  $E = 1$  GeV is not always the best energy for maximizing the nuclei yields (see sect. 4 and figs. 5–8). Remark (1): Nuclei obtained after a long evaporation process are most of the time overestimated by CEM2k and underestimated by INCL4/ABLA (see the mass distribution for iron in ref. [6]). Remark (2): For neutron poor nuclei the yield can fall down of more than one order of magnitude for two isotopes with only 1 mass difference [8] (here  $^{17}\text{Ne}$  and  $^{18}\text{Ne}$ ). Remark (3): A specific benchmark should be done for light targets (needs of data) to disentangle between both models.

Isotope	Optimal target(s) for $E = 1$ GeV	Maximal yield [atom/s]		MCNP statistical error [%]		Additional remarks
		INCL4/ABLA	CEM2k	INCL4/ABLA	CEM2k	
$^9\text{Li}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$ ; SiC	$2.5 \cdot 10^{11}$ ; $1.1 \cdot 10^{11}$	$4.5 \cdot 10^{11}$ ; $1.3 \cdot 10^{12}$	3; 4	2; 1	Remark (1)
$^{11}\text{Li}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$1.8 \cdot 10^9$	$3.6 \cdot 10^{10}$	30	6	Remark (1)
$^7\text{Be}$	SiC	$1.2 \cdot 10^{13}$	$1.2 \cdot 10^{13}$	< 1	< 1	Remark (1)
$^{11}\text{Be}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$1.3 \cdot 10^{11}$	$4.4 \cdot 10^{11}$	3	2	Remark (1)
$^{12}\text{Be}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$	$3 \cdot 10^{10}$	$2.3 \cdot 10^{11}$	7	3	Remark (1)
$^{17}\text{Ne}$	SiC	$1.3 \cdot 10^{10}$	$3.7 \cdot 10^9$	30	20	Remarks (2), (3)
$^{18}\text{Ne}$	SiC	$1.9 \cdot 10^{12}$	$8.6 \cdot 10^{10}$	< 1	5	Remarks (2), (3)
$^{25}\text{Ne}$	$\text{Al}_2\text{O}_3$ ; Pb	$1.2 \cdot 10^{10}$ ; $3.7 \cdot 10^8$	$2.4 \cdot 10^9$ ; $3.9 \cdot 10^9$	13; 100	25; 30	Remark (3)
$^{20}\text{Mg}$	SiC	$2.3 \cdot 10^{11}$	$2.4 \cdot 10^{10}$	3	8	Remark (3)
$^{30}\text{Mg}$	Pb; $\text{UC}_3$	$2.5 \cdot 10^8$ ; $2.5 \cdot 10^8$	$5.1 \cdot 10^9$ ; $3.1 \cdot 10^9$	100; 100	20; 20	CEM2k: overestimates with a factor $\geq 3$ [7]
$^{46}\text{Ar}$	Pb; $\text{UC}_3$	$1.2 \cdot 10^8$ ; $8.7 \cdot 10^8$	$2.7 \cdot 10^{10}$ ; $3.1 \cdot 10^{10}$	100; 40	10; 8	CEM2k: overestimates with a factor $\geq 3$ [7]
$^{56}\text{Ni}$	Pb; $\text{UC}_3$	$1.2 \cdot 10^8$ ; no event	$2.8 \cdot 10^{10}$ ; $2 \cdot 10^{10}$	100; no event	10; 9	CEM2k: overestimates with a factor $\approx 100$ [7]
$^{72}\text{Ni}$	$\text{UC}_3$	$1.1 \cdot 10^{10}$	$1.1 \cdot 10^{11}$	15	4	CEM2k: overestimates with a factor $\geq 5$ [7]
$^{63}\text{Ga}$	Pb; $\text{UC}_3$	$2.5 \cdot 10^8$ ; no event	$2.1 \cdot 10^{10}$ ; $2.4 \cdot 10^{10}$	100; no event	10; 9	CEM2k: overestimates with a factor $\approx 100$ [7]
$^{81}\text{Ga}$	$\text{UC}_3$	$2.1 \cdot 10^{10}$	$1.8 \cdot 10^{11}$	10	3	CEM2k: overestimates with a factor $\geq 5$ [7]
$^{74}\text{Kr}$	Pb; $\text{UC}_3$	$1.2 \cdot 10^8$ ; no event	$1.9 \cdot 10^{10}$ ; $1.5 \cdot 10^{10}$	100; no event	9; 10	CEM2k: overestimates with a factor $\approx 100$ [7]
$^{92}\text{Kr}$	$\text{UC}_3$	$1.1 \cdot 10^{12}$	$8 \cdot 10^{11}$	2	2	
$^{107}\text{Sn}$	Pb; $\text{UC}_3$	$2.5 \cdot 10^8$ ; $1.2 \cdot 10^8$	$1.1 \cdot 10^{10}$ ; $1.6 \cdot 10^{10}$	60; 100	15; 10	CEM2k: overestimates with a factor $\approx 10$ [7]
$^{132}\text{Sn}$	$\text{UC}_3$	$2.3 \cdot 10^{11}$	$3.3 \cdot 10^{11}$	4	3	
$^{180}\text{Hg}$	Pb	$1.5 \cdot 10^{10}$	$1.2 \cdot 10^{10}$	10	12	
$^{206}\text{Hg}$	Pb	$5.7 \cdot 10^{11}$	$1.9 \cdot 10^{10}$	2	10	INCL4/ABLA: overestimates with a factor $\geq 5$ [8]
$^{205}\text{Fr}$	$\text{UC}_3$	$1.7 \cdot 10^9$	$9.6 \cdot 10^{10}$	30	4	INCL4/ABLA: underestimates [7]; CEM2k: overestimates [7]

FIGURE 3.23 – Rendements de production optimaux des noyaux étudiés dans le cadre du projet EURISOL-DS pour les cibles directes. Ce tableau est tiré de (Chabod et al. 2008) et la légende a été conservée pour garder les différentes remarques. Les références données dans le tableau sont les suivantes : [6] (David et al. 2007a), [7] (David et al. 2007b) et [8] (Boudard et al. 2002).

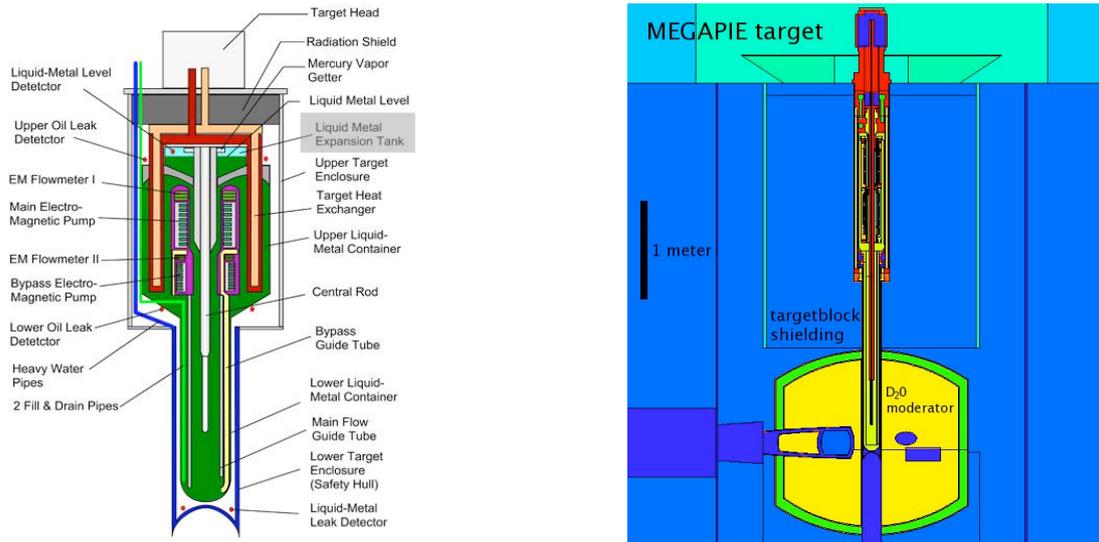


FIGURE 3.24 – Vues schématiques de la cible de spallation MEGAPIE. À gauche, les détails des composants de la cible, et à droite la géométrie utilisée dans le code de transport MCNPX2.5.0 avec la cible et les autres éléments de l'installation SINQ comme l'eau lourde. Figures tirées de (Zanini et al. 2008).

### 3.2.2 Megapie

MEGAPIE (**MEGA**watt **PI**lot **E**xperiment) est un prototype de cible de spallation plomb-bismuth liquide (en anglais LBE pour *Lead Bismuth Eutectic*). C'est un projet européen lancé en 2001 (Bauer et al. 2001) auquel d'autres laboratoires se sont joints, comme JAEA (Japon) et KAERI (Corée du Sud). Il avait pour but de concevoir, construire et faire fonctionner la cible de spallation d'environ 1 MW de puissance à PSI (Paul Scherrer Institute - Suisse) dans l'installation SINQ, une source de neutron de spallation. La figure 3.24 donnent deux vues de la cible dont une (à droite) telle qu'elle est utilisée dans le code MCNPX. L'irradiation a duré quatre mois d'août à décembre 2006 avec des protons de 575 MeV et une intensité moyenne de 0,947 mA.

Notre rôle dans le projet a été de simuler les activités, notamment dans la cible, son conteneur et sa fenêtre, à la fin de l'irradiation et pendant le refroidissement, ainsi que les quantités de noyaux volatiles. Ceci, encore une fois, a été fait avec différents codes de spallation. C'est le premier point que j'aborderai dans cette section. Le deuxième point concerne l'apport récent des versions améliorées, INCL4.5 (INCL4.6) et Abl07, aux résultats précédents. Le dernier et troisième point traite d'une expérience faite à l'installation ISOLDE du CERN (Tall et al. 2008), mais en lien avec MEGAPIE, puisqu'elle a servi à mesurer des noyaux volatiles dans une cible liquide de plomb-bismuth et en particulier l'astate.

La figure 3.25 donne les activités totales calculées par INCL4.2-Abla dans la cible, le conteneur et la fenêtre. On peut y voir les contributions des neutrons de basses énergies. L'activité totale de la cible atteint environ  $10^7$  GBq alors que celle du conteneur ou de la fenêtre sont dix voire cent inférieures. Cependant, si l'on considère les activités spécifiques, les comparaisons changent :  $\sim 10^{10}$  Bg/g pour le LBE et le conteneur et  $\sim 10^{11}$  Bg/g pour la fenêtre. Cela vient du fait que la cible est volumineuse (82 litres) contrairement à la fenêtre (0,087 litres). Les neutrons de basses énergies sont la principale contribution pour le conteneur, puisque ce dernier ne voit pas directement le faisceau, et ils ne jouent en revanche qu'un rôle

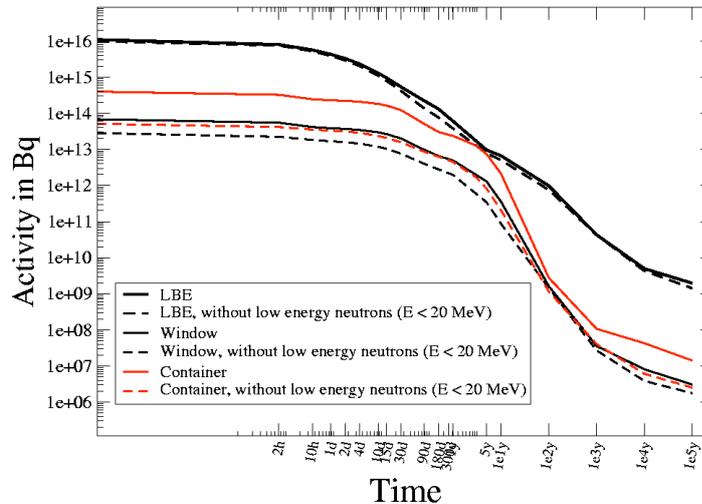


FIGURE 3.25 – Activités en fonction du temps de refroidissement dans la cible LBE, le conteneur et la fenêtre de MEGAPIE. L'irradiation a duré 123 jours avec un faisceau de proton de 575 MeV à une intensité de 0,947 mA. Les activités totales sont en traits pleins et les activités sans la contribution des neutrons de basses énergies ( $\leq 20$  MeV) sont en tireté. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla. Figure tirée de (David et al. 2008).

très mineur pour la cible pour la raison inverse. Autour de cent jours la contribution des neutrons de basses énergies dans la cible est due à leur capture sur le  $^{209}\text{Bi}$  qui donne ainsi le  $^{210}\text{Po}$  de demi-vie 138 jours. Le cas de la fenêtre est entre les deux, dans le sens où elle voit directement le faisceau, mais, étant de faible épaisseur par rapport au libre parcours moyen des protons de 575 MeV dans ce matériaux (majoritairement du fer), une fraction seulement du faisceau interagit, contrairement à la cible, ce qui fait que l'activité vient à moitié du faisceau et à moitié des neutrons de basses énergies réfléchis par la cuve d'eau lourde.

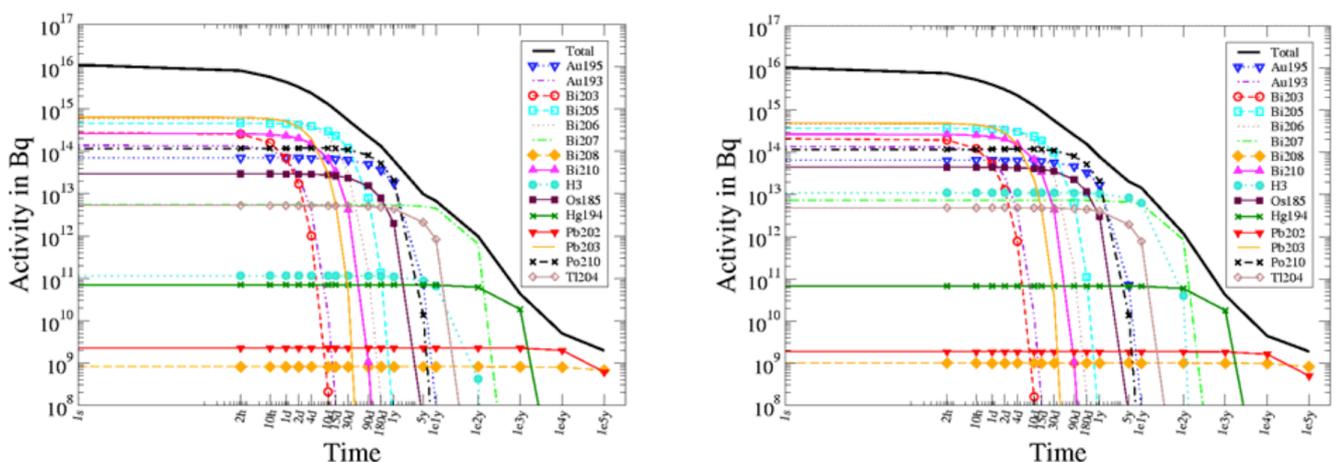


FIGURE 3.26 – Principaux contributeurs à l'activité de la cible LBE. Les calculs sont faits avec INCL4.2-Abla (gauche) et Bertini-Dresner (droite). Autres détails, voir figure 3.25. Figures tirées de (David et al. 2008).

Les calculs ont été faits avec d'autres codes et le résultat de la comparaison était que les différences sur les activités étaient faibles. La figure 3.26 montre deux

graphes présentant les principaux contributeurs dans le cas de la cible LBE, l'un avec INCL4.2-Abla (gauche) et l'autre avec Bertini-Dresner (droite). L'activité est due à de nombreux contributeurs, tous des noyaux de charges et masses proches de celle du plomb et du bismuth. Or, d'une manière générale, les codes produisent ces noyaux à des taux assez semblables, d'où des activités totales similaires. La différence notable est autour de dix ans de refroidissement et due au tritium. Cette différence rencontrée déjà dans l'étude sur EURISOL, section précédente, était expliquée par la non-émission par INCL4.2 et Abla de tritium et donc leur défaut à ce sujet. Le sujet est repris et détaillé plus loin dans l'étude avec les nouvelles versions, INCL4.5 et Abla07. Le cas du conteneur montre encore moins de différences du fait d'une proportion importante due aux neutrons de basses énergies, rendant le rôle des modèles de spallation moins crucial. Pour la fenêtre, sujette à des réactions par des protons quasiment mono-énergétiques de 575 MeV, la contribution d'un isotope ayant perdu quelques charges et masses par rapport aux noyaux cibles (ici autour du fer) peut être importante, puisque l'on sait que les modèles commencent à diverger dans ces régions, comme c'est le cas pour le  $^{44}\text{Ti}$ . Pour les deux derniers cas les figures sont dans (David et al. 2008), page 7.

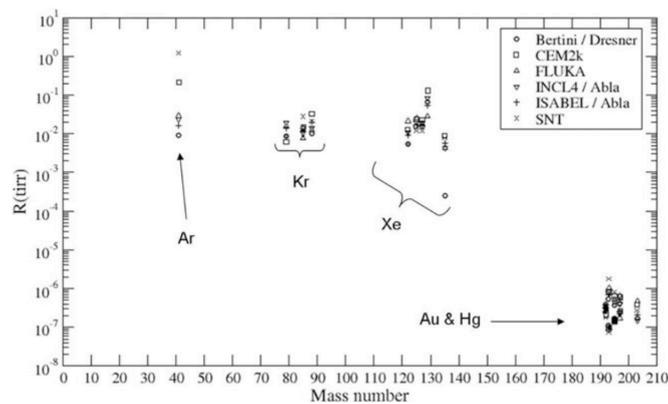


FIGURE 3.27 – Rapports entre les activités mesurées dans le bac de récupération et les activités calculées dans la cible LBE en fonction de la masse  $A$  des isotopes. Les codes utilisés sont disponibles dans MCNPX2.5.0, sauf les codes FLUKA (Ferrari et al. 2005) et SNT (Korovin et al. 1992). Figure tirée de (Thiollière et al. 2011).

Les éléments volatiles n'ont pas un poids important dans les activités décrites précédemment, mais ils restent un risque en cas d'accident. Étant volatiles ils se dispersent facilement et de ce fait il faut connaître leur quantité et leur taux d'activité. Dans ce cas des mesures ont été prises. Elles consistaient en la récupération de gaz relâchés et en la mesure d'activités d'isotopes (Thiollière et al. 2011). La figure 3.27 montre les rapports obtenus entre les activités calculées par différents modèles dans la cible et les mesures effectuées sur les échantillons des bacs de récupération. Si les modèles sont en général d'accord à un facteur 3 près, le cas de l'Ar est un peu différent. Ceci reflète le fait déjà mentionné que les modèles divergent dans leurs résultats lorsque l'on regarde les noyaux loin en charge des noyaux cibles. D'autres conclusions sont tirées de cette figure, comme des taux de relâchement constants pour les gaz rares et différents d'autres volatiles comme le mercure (l'or venant de la décroissance du mercure). Un autre point intéressant de cet article et des mesures faites est l'importance des noyaux métastables dans l'activité due aux volatiles. Le calcul des taux de production des noyaux métastables est rarement fait par les codes de spallation. Il existe par exemple dans MCNPX une possibilité pour tenir compte de la production des noyaux métastables (page

C-11 de (Pelowitz 2005)), mais cette estimation basée sur des fractions tabulées et dépendantes des énergies d'excitation des noyaux résiduels est sujette à caution et devrait être étudiée plus spécifiquement<sup>4</sup>.

Après l'irradiation de quatre mois on a laissé la cible se refroidir jusqu'en juillet 2009 où le démantèlement de la cible a commencé. Des morceaux de cible ont été découpés et envoyés en 2011 dans des cellules chaudes pour y être analysés. Dans le cadre du projet européen ANDES (**A**ccurate **N**uclear **D**ata for nuclear **E**nergy **S**ustainability) nous avons pour tâche de calculer les activités des échantillons de cible analysés, d'ici 2013.

Entre les calculs faits pour MEGAPIE avec les anciennes versions INCL4.2 et Ablat et les prochains calculs sur les échantillons analysés après irradiation et refroidissement, nous avons repris les calculs d'activités avec les nouvelles versions INCL4.5 et Ablat07 une fois ces dernières implantées dans une version  $\beta$  de MCNPX2.7. La figure 3.28 donne les résultats pour la cible et la fenêtre. On voit que maintenant la production du tritium par ces nouvelles versions est de l'ordre de grandeur de celles données par les autres codes pour la cible comme pour la fenêtre où la contribution du tritium est significative comparativement à INCL4.2-Ablat. Le graphe dans le cas de la fenêtre est là aussi pour illustrer les possibles artefacts des figures. Ainsi la contribution du tritium ne se voit pas sur la courbe de l'activité totale entre dix et cent ans pour la simple et bonne raison que les pas en temps non pas été dans ce cas assez resserrés.

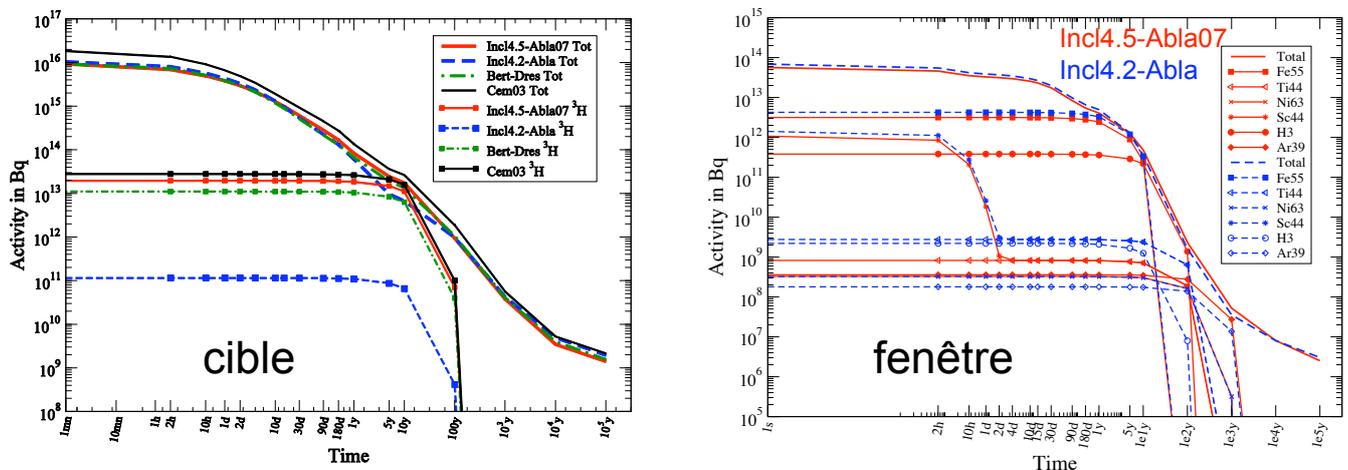


FIGURE 3.28 – Activités totales en fonction du temps de refroidissement dans la cible LBE et la fenêtre de MEGAPIE. Pour la cible (gauche) quatre modèles sont représentés, INCL4.5-Ablat07, INCL4.2-Ablat, Bertini-Dresner et CEM03 (version MCNPX2.6), ainsi que les contributions du tritium. Pour la fenêtre (droite) deux modèles sont représentés, INCL4.5-Ablat07 et INCL4.2-Ablat, avec les principaux contributeurs.

intéressant aussi par une contribution pas forcément attendue. Si les neutroniciens des réacteurs considèrent l'évolution de la composition de leur combustible sur les longues irradiations, les cibles de spallation irradiées sur de longues périodes avec des faisceaux intenses ne sont pas légions, et l'on reste souvent avec l'a priori que la composition des matériaux n'évolue pas de manière significative. Ainsi, dans le cas de la fenêtre, les calculs ont montré que trente pourcents environ du tritium étaient dus à  $^3\text{He}$  produit par la spallation et au flux de neutrons important bai-

4. Discussion privée avec Mike James, co-développeur de MCNPX

gnant cette fenêtre. En fait 29,7% venant de  $^3\text{He}$  et 1,6% du  $^6\text{Li}$ . Un calcul de *coin de table* permet de retrouver ces ordres de grandeur. Le taux de production d'un isotope étant le produit de la densité de noyau cible par le flux de projectiles et par la section efficace de production de cet isotope par le projectile sur le noyau cible donné, nous avons tiré et/ou estimé ces informations à partir des données de base et des calculs (voir tableau 3.1) pour obtenir les résultats de 20,5% venant de  $^3\text{He}$  et 0,4% du  $^6\text{Li}$ . Ainsi c'est la conjonction de la production d' $^3\text{He}$  dans un environnement baigné par un haut flux de neutrons de basses énergies et d'une section efficace importante qui a conduit à une forte contribution pour la formation de tritium. D'ailleurs dans le cas de la cible les productions directes (faisceau) de tritium sont beaucoup plus importantes que pour la fenêtre de petite taille, comparative-ment au libre parcours moyen des protons de haute énergie, d'où une contribution négligeable des  $^3\text{He}$  au tritium. Enfin, non seulement INCL4.5-Abla07 est capable maintenant de produire le tritium, mais de plus de manière tout à fait correcte, comme les figures 3 et 6 de la référence (Leray et al. 2010) le montrent, à la fois pour la production directe (tritium) qu'indirecte ( $^3\text{He}$ ).

	Fe	$^3\text{He}$	$^6\text{Li}$
densité de noyau cible (noyau/barn.cm)	$8 \cdot 10^{-2}$	$1,3 \cdot 10^{-7}$	$1,7 \cdot 10^{-8}$
section efficace de production (barn)	$8 \cdot 10^{-2}$	$8,5 \cdot 10^2$	$1,5 \cdot 10^2$
flux de projectile (part./proton incident/cm <sup>2</sup> )	$2 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$3 \cdot 10^{-2}$

TABLE 3.1 – Valeurs des paramètres utilisés pour le calcul de coin de table des contributions à la production de tritium. Les densités sont des données de base ou tirées des calculs du code CINDER'90, les sections efficaces tirées de (Leray et al. 2010) pour le fer et des bibliothèques de CINDER'90 moyennées sur le spectre des neutrons en jeu, et les flux sont donnés par les calculs MCNPX.

En lien avec MEGAPIE et pour mesurer les éléments volatiles produits par une cible de plomb-bismuth chauffée pour la maintenir liquide, l'expérience IS419 à ISOLDE (CERN) a été menée en parallèle (2004-2005). Il s'agissait donc d'une cible liquide formée d'un cylindre de 20 cm de long et de 1 cm de rayon, bombardée par des protons de 1 et 1,4 GeV. Le point qui nous avait interpellé concernait la production d'astate (Tall et al. 2008). Si le polonium produit par la capture de neutron sur le bismuth, notamment le  $^{210}\text{Po}$ , ne pose pas tant de soucis, car ils ne sont pas relâchés aux températures de fonctionnement d'une cible comme MEGAPIE (300-400 °C), les noyaux d'astate, eux, sont plus volatiles et ils décroissent vers les polonium. De plus, et c'est là où on était impliqué, les modèles de spallation utilisés, dont INCL4.2-Abla, pour reproduire les données prises étaient incapables de fournir de bons résultats (Tall et al. 2008). Ces résultats ne sont pas si étonnants si l'on regarde les modes de production de l'astate à partir d'une cible de plomb-bismuth. Le premier mode est l'émission d'un  $\pi^-$  par les protons incidents (voire toute particule de charge +1) sur le bismuth,  $^{209}\text{Bi}(p, \pi^- xn) ^{210-x}\text{At}$ , et le second est l'interaction des héliums secondaires avec le bismuth,  $^{209}\text{Bi}(^3\text{He}, xn) ^{212-x}\text{At}$  et  $^{209}\text{Bi}(^4\text{He}, xn) ^{213-x}\text{At}$ . Or ces deux modes, et surtout le second, ne sont pas les voies les mieux reproduites. Les tous premiers résultats que l'on obtint (Ghali 2010) avec INCL4.5-Abla07 ne furent pas très satisfaisants pour deux raisons. La première était que la production d'astate via les héliums se faisait avec des héliums de basses énergies, inférieures à 100 MeV, et que ce genre de réaction marie deux difficultés, des projectiles composites et des énergies en deçà de celles de la spallation. Une étude spécifique de ces réactions dont l'utilité a déjà été men-

masse (A)	mode de production			
	$^{209}\text{Bi}(p,\pi^-xn)^{210-x}\text{At}$	$^{209}\text{Bi}(\pi^+,\pi^-xn)^{209-x}\text{At}$	$^{209}\text{Bi}(^3\text{He},xn)^{212-x}\text{At}$	$^{209}\text{Bi}(^4\text{He},xn)^{213-x}\text{At}$
204	73	5	15	7
206	38	2	32	28
207	27	0	34	39
209	5	0	18	77
210	0	0	4	96

TABLE 3.2 – Contributions en pourcentage des différentes voies pour la production de chaque isotope de l'astate (cas 1,4 GeV).

tionnée dans un autre contexte, la cosmogénèse (section 3.1.3), a permis dans la version INCL4.6 d'obtenir des résultats bien meilleurs. La seconde raison était l'hypothèse couramment faite que les éléments produits dans la cible sont immédiatement relâchés. Ce n'est pas toujours justifié pour certains éléments. Ainsi, utilisant INCL4.6-Abla07 dans une version  $\beta$  du code MCNPX2.7 et prenant en compte différents temps de relâchement<sup>5</sup>, les résultats sont devenus très corrects (temps  $\approx 10$ h), comme le montre la figure 3.29. L'étude de l'importance de chaque mode pour la production des isotopes (tableau 3.2) explique pourquoi les masses  $A=209$  et  $A=210$  ont été nettement améliorées après les progrès de INCL4.6 dans la simulation des réactions avec des composites de basses énergies (David et al. 2013).

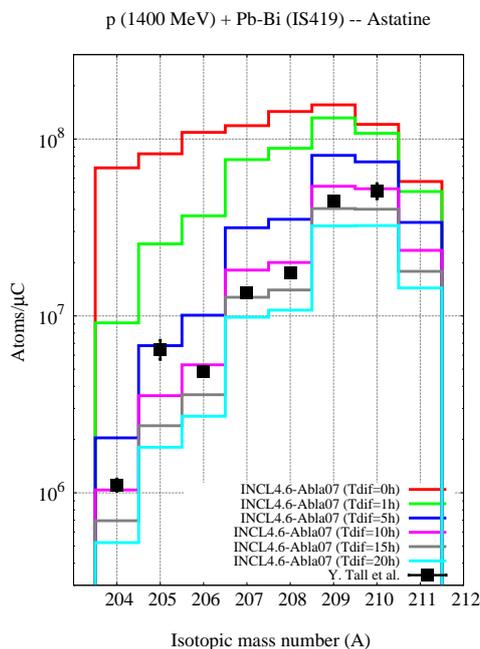


FIGURE 3.29 – Taux de production d'isotopes de l'astate dans une cible de plomb-bismuth liquide. Les données expérimentales (Tall et al. 2008) ont été fournies par A. Guertin (Subatech) et L. Zanini (ESS) et les calculs ont été faits avec INCL4.6-Abla07 implantés dans une version  $\beta$  de MCNPX2.7 et en prenant en compte différents temps de relâchement.

5. Aucune mesure de ce temps n'existe pour l'astate aujourd'hui.

### 3.2.3 ESS

ESS (*European Spallation Source*) est le projet de la future source de neutrons de spallation européenne. Elle sera construite à Lund en Suède grâce au partenariat de dix sept pays. Elle deviendra la source la plus puissante au monde, devant les installations récentes SNS (*Spallation Neutron Source*) aux États-Unis et J-PARC *Spallation Neutron Source* au Japon. Les champs d'utilisation des faisceaux de neutrons obtenus sont multiples : étude de la matière condensée, étude de la structure de molécules pour la biologie, imagerie pour l'industrie, etc. Si les sources de spallation ont pris le pas ces dernières années sur les réacteurs, pour ce qui est des sources de neutrons, c'est dû à une marge de progression technique plus importante<sup>6</sup>, qui a d'abord permis à celles-ci d'arriver au niveau des réacteurs pour l'intensité délivrée, puis de les dépasser (voir annexe A.4). L'installation ESS devrait fournir les premiers faisceaux en 2019. Notre rôle s'inscrit dans le projet de mise à jour de la conception de la cible (TSDU en anglais pour *Target Station Design Update Project*) dont le but est de fournir les informations, les connaissances les plus récentes afin de préparer le TDR (*Technical Design Report*), qui doit être rendu fin 2012 et a pour objectif de prouver la faisabilité du projet ESS tant technique que financier. Nous nous sommes donc attachés à fournir la validation de nos codes de spallation concernant le volet sûreté de la cible, ainsi que faire l'estimation des isotopes produits et potentiellement dangereux (radioactivité, volatilité). La cible prévue est un disque de tungstène bombardé par des protons de 2,5 GeV.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10		
<sup>187</sup> W	<sup>148</sup> Gd	<sup>186</sup> Re	<sup>182</sup> Ta	<sup>172</sup> Hf	<sup>185</sup> W	<sup>188</sup> Re	<sup>178</sup> Hf(m1)	<sup>179</sup> Hf(m1)	<sup>169</sup> Yb		
17,63%	14,14%	12,04%	7,85%	7,79%	5,97%	5,16%	4,68%	2,66%	2,29%		
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22
<sup>183</sup> Ta	<sup>175</sup> Hf	<sup>173</sup> Lu	<sup>125</sup> I	<sup>179</sup> Ta	<sup>146</sup> Gd	<sup>172</sup> Lu	<sup>171</sup> Lu	<sup>149</sup> Tb	<sup>170</sup> Tm	<sup>170</sup> Lu	<sup>167</sup> Tm
2,21%	1,61%	1,47%	1,32%	1,06%	0,82%	0,72%	0,62%	0,50%	0,44%	0,42%	0,37%

FIGURE 3.30 – Liste des isotopes les plus dangereux d'un point de vue radiologique. Les pourcentages sont les contributions de chacun d'après une première étude faite par D. Ene (ESS) (Ene 2011). Les fonds bleus indiquent les cas où les protons ne sont pas la voie principale pour la production de ces isotopes ou les cas des métastables, non fournis par nos codes. Les cadres rouges indiquent les isotopes pour lesquelles des données expérimentales existent.

La validation s'est faite sur les fonctions d'excitation de production par des protons des isotopes jugés dangereux. Le choix de se restreindre aux protons est dû aux données expérimentales disponibles qui sont quasiment inexistantes pour les autres particules issues de la spallation et qui peuvent elles aussi produire ces isotopes. La liste des isotopes dangereux a été fournie par D. Ene (ESS) dans la référence (Ene 2011). Le tableau donné par la figure 3.30 recense ces isotopes par ordre croissant de dangerosité, c'est-à-dire en fonction de la dose radiologique par inhalation, et ce après cinq ans de fonctionnement. Les volatiles, bien que souvent moins radioactifs que ceux de la liste citée précédemment, se dispersent facilement et sont de ce fait un risque à évaluer à la fois en fonctionnement, en maintenance et lors d'accident. Les données étant très peu nombreuses pour ces derniers sur

6. Notamment les intensités des faisceaux de protons délivrées par les accélérateurs (ex. : le projet [Iphi](#))

le tungstène, A. Leprince, post-doc en charge des calculs de l'étude ESS pour le SPHn, a utilisé dans ce cas les données venant des cibles de plomb (Leprince et al. 2012). Je ne donne ici, figure 3.31, que les résultats obtenus pour les quatre isotopes les plus dangereux du tableau, si on excepte le  $^{187}\text{W}$  qui lui est majoritairement produit par capture de neutrons de basses énergies.

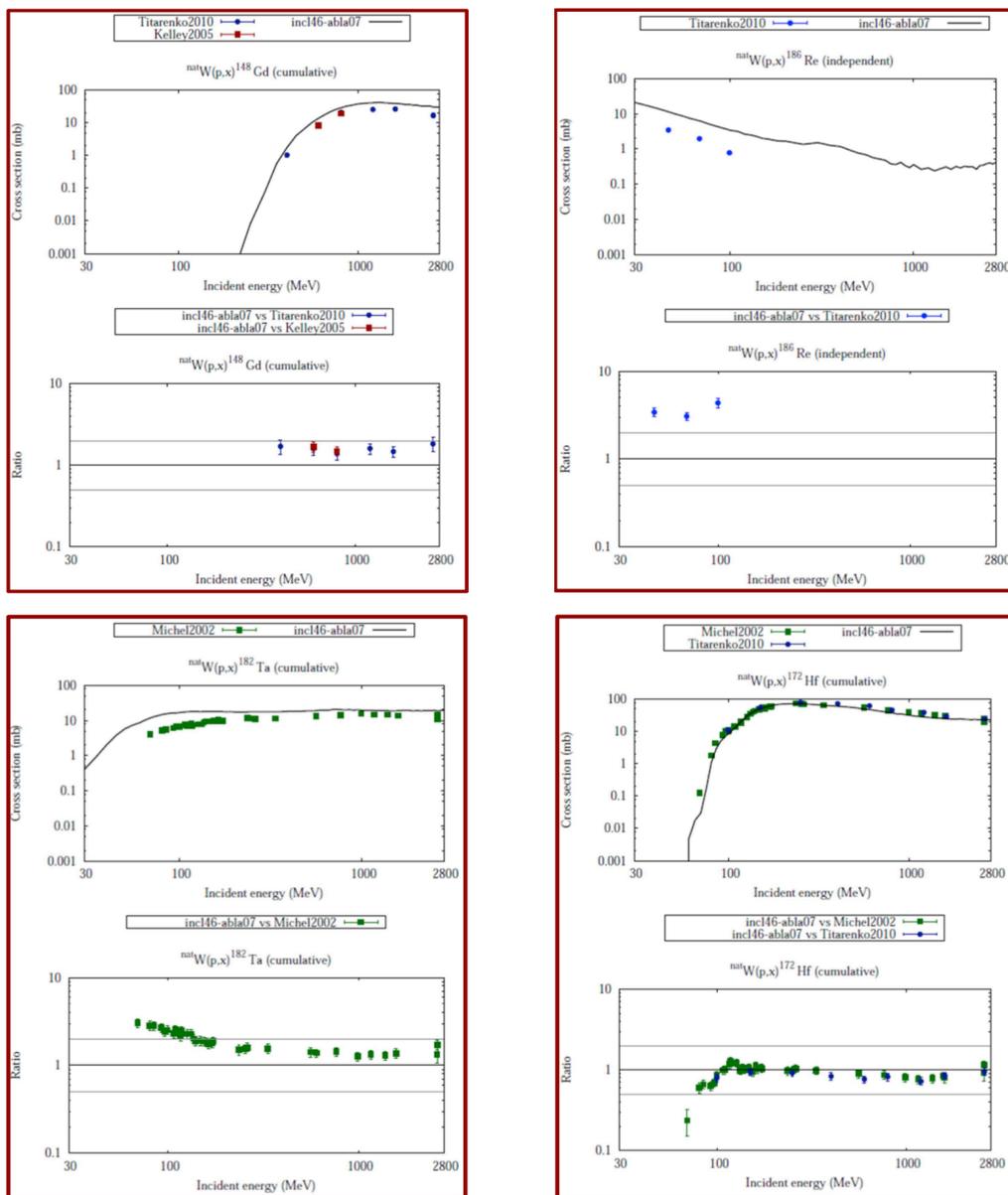


FIGURE 3.31 – Sections efficaces de production de quatre isotopes, le  $^{148}\text{Gd}$  (en haut à gauche), le  $^{186}\text{Re}$  (en haut à droite), le  $^{182}\text{Ta}$  (en bas à gauche) et le  $^{172}\text{Hf}$  (en bas à droite), en fonction de l'énergie du proton sur une cible de  $^{nat}\text{W}$ . Les rapports entre les calculs et les mesures sont donnés en dessous de chaque graphe de sections efficaces. Figures tirées de (Leprince et al. 2012).

Les graphes donnent non seulement les sections efficaces de production des isotopes, mais aussi, en dessous, les rapports entre notre modèle INCL4.6-Abla07 et les données expérimentales. Ces rapports permettent d'avoir une idée quantitative de la performance du modèle sur la gamme en énergie. D'une manière générale le modèle donne des résultats à un facteur 2 près par rapport aux données, voire souvent mieux. Il y a bien sûr des cas, mais peu nombreux, où se rapport est moins

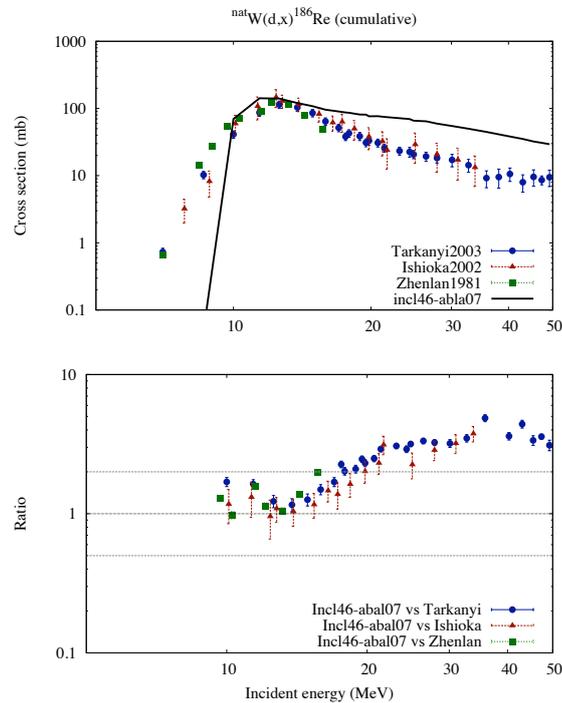


FIGURE 3.32 – Sections efficaces de production du  ${}^{186}\text{Re}$  en fonction de l'énergie du deuton sur une cible de  ${}^{\text{nat}}\text{W}$ . Les rapports entre les calculs et les mesures sont donnés en dessous du graphe de sections efficaces.

bon. Ainsi sur les trois points de mesures du  ${}^{186}\text{Re}$  le rapport est de l'ordre de 3-4 et à basse énergie ( $\leq 100$  MeV) pour le  ${}^{182}\text{Ta}$  le rapport dépasse 2. Ces comparaisons ont d'abord permises de montrer que sur le tungstène INCL4.6-Abla07 donnaient des résultats tout à fait corrects sur toute la gamme en énergie (de quelques dizaines de MeV à 2,6 GeV), et ensuite d'estimer les erreurs pour chaque isotope, là aussi sur toute la gamme. L'estimation de l'incertitude du calcul sur la production dans la cible ESS elle-même des isotopes devra évidemment se faire en connaissance de ces rapports, mais aussi des flux de protons rencontrés. Pour certains isotopes il faudra aussi estimer la contribution des autres particules incidentes. Ainsi dans le cas du  ${}^{186}\text{Re}$  les deutons peuvent aussi avoir une contribution importante, si leur flux est non-négligeable. Les données sont en général malheureusement rares, mais la figure 3.32 en donne un exemple. Le calcul de ces productions en cible réelle et des activités associées est en cours. Je ne donne ci-dessous que les grandes lignes et un premier exemple de résultat.

La figure 3.33 donne le type de géométrie modélisée dans MCNPX. On y voit l'anneau de tungstène de 2,5 m de diamètre, le refroidissement à l'hélium, le modérateur, le réflecteur et le blindage d'acier (le faisceau de protons venant de la gauche). Le premier constat pour obtenir des résultats statistiquement significatif est le temps de calcul. Si l'on additionne les calculs MCNPX, faits en partie en parallèle, et l'analyse des résultats pour obtenir les informations, il faudra compter pour une géométrie donnée de l'ordre de un mois de travail. Mais le résultat encore plus intéressant concernant le temps de calcul est la comparaison faite entre

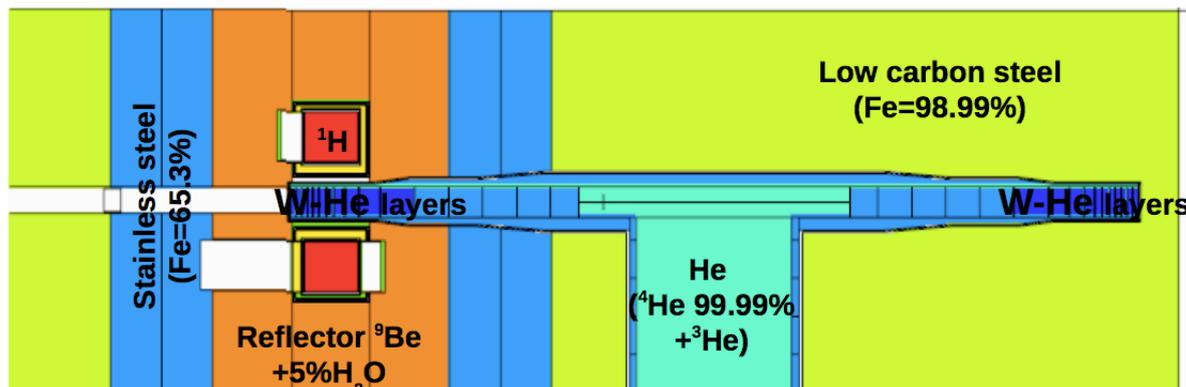


FIGURE 3.33 – Exemple de géométrie de la cible ESS modélisée dans MCNPX.

trois modèles de spallation disponibles dans MCNPX, à savoir Bertini-Dresner, CEM03 et INCL4.6-Abla07. Un calcul avec 10000 protons incidents a pris pour Bertini-Dresner 142 mn, pour CEM03 136 mn et pour INCL4.6-Abla07 131 mn, ce qui montre que, quel que soit le modèle utilisé, le temps de calcul pour la cible ESS reste le même. Le temps de calcul est donc vraisemblablement imposé par le transport et non par les réactions de spallation. Dans ce cas, le choix du modèle de spallation n'est gouverné que par sa fiabilité sur les résultats physiques. L'autre point à noter sur ces résultats préliminaires est l'apport des outils adjoints à l'implantation de nos codes dans MCNPX, à savoir les Ntuples, informations utilisables par les logiciels PAW et ROOT et permettant une analyse fine des résultats. La figure 3.34 montre pour exemple les origines de la production du  $^{148}\text{Gd}$ . On voit ainsi que ce sont majoritairement les protons de hautes énergies qui sont responsables de sa production et que par conséquent les estimations d'incertitudes obtenues pour le  $^{148}\text{Gd}$  sur la figure 3.31 donnent une bonne idée de celles pour la production dans la cible réelle.

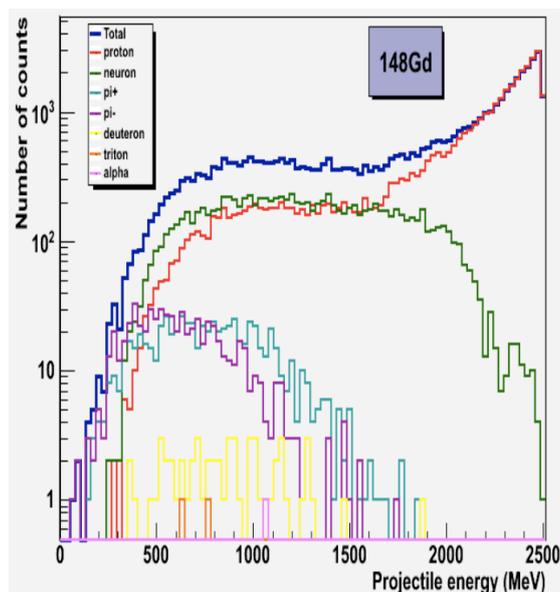


FIGURE 3.34 – Contributions des différentes particules à la production de  $^{148}\text{Gd}$  en fonction de leur énergies. Calcul fait avec INCL4.6-Abla07 dans une version  $\beta$  de MCNPX2.7.

Les calculs complets prendront en compte les historiques d'irradiation pour estimer les activités totales et dues à chaque isotope.

## CONCLUSION DU CHAPITRE

À l'instar de la validation qui peut se décliner selon deux modes, cibles minces et cibles épaisses, l'utilisation de la modélisation peut s'orienter suivant deux directions, construction de bases de données et appel des modèles dans un code de transport. Si notre ambition n'est pas de construire des bases de données du type ENDF ou ACE utilisées par les codes de transport, car cela dépasse nos forces vives, au travers de trois exemples j'ai montré le potentiel du modèle INCL4.6-Abla07 et son intérêt notamment dans le cas de bases de données en format ASCII (ex. : cosmogénie). Des simulations de cibles de spallation faites pour trois installations, avec INCL4.2-Abla et INCL4.6-Abla07 dans MCNPX, ont montré, là aussi, les améliorations apportées par les nouvelles versions, le retour d'expérience sur les axes de développement des modèles et la nécessité de bien connaître l'outil pour en tirer le meilleur profit. Il faut noter que, si les bases de données permettent des calculs bien plus rapides que l'appel des modèles dans les codes de transport, le revers de la médaille est la perte des corrélations permettant une meilleure analyse des résultats.

Dans ce chapitre, et surtout la section 3.2, on y voit l'utilisation de modèles de spallation parmi tout un ensemble de processus (transport, décroissance, diffusion-effusion, etc.), ce qui relativise les qualités, performances de la modélisation suivant les cas étudiés. Si d'un côté il y a des cas où une part importante des incertitudes est imposée par ailleurs, comme, par exemple, les productions de noyaux radioactifs (section 3.2.1) dont les rendements sont fortement liés aux coefficients de diffusion-effusion et ionisation, il y a d'autres cas où des améliorations dans la modélisation de la réaction de spallation portent leurs fruits, comme, par exemple, la bonne prise en compte des particules composites, en émission et en tant que projectiles sur un large spectre en énergie, qui permet des estimations correctes des noyaux de charges supérieures à la cible (cas de l'astate par le bismuth).



**S'** APPUYANT sur l'expérience tirée des travaux traités dans les chapitres précédents et de ceux faits par ailleurs, que ce soit dans le groupe, par les collaborateurs ou autres, ce chapitre tente d'apporter des éléments de réponses aux trois questions suivantes : les données expérimentales obtenues depuis des décennies ne sont-elles pas assez nombreuses et de qualité suffisante pour suffire aux simulations de toute sorte ? Que peuvent encore apporter les modèles ? Quels sont leurs champs d'action, leurs portées ?

## 4.1 AU-DELÀ DES DONNÉES OU *Think beyond...*

Le travail de validation des modèles pour la production des noyaux résiduels dans une cible épaisse, dont il a été question au chapitre 2 (section 2.3.2, page 80), peut aussi être un bon exemple de l'absolue nécessité d'avoir recours aux codes de calcul pour toute simulation mettant en jeu des réactions de spallation. Dans une contribution pour ND2007 (Pohorecki et al. 2007) en collaboration avec les responsables de l'expérience qui a servi à ce *benchmark*, j'avais cherché à mettre en lien ces mesures avec celles des sections efficaces élémentaires de production des isotopes, encore appelées fonctions d'excitation, et dont il est fait mention entre autres dans ce même chapitre 2 (figure 2.14, page 67). Que ce soit purement par le calcul ou en ayant recours aux fonctions d'excitations expérimentales, la quantité d'un isotope produit dans un échantillon de la cible épaisse (dans ce cas une tranche du cylindre <sup>1</sup>) peut s'écrire,

$$\int_E \sigma_{isot}^N(E) \frac{e \rho N_a}{M_{mol}} F \Phi^{(p_p, p_s, n_s)} dE = \frac{A_{isot}}{\lambda_{isot}} \rho \text{ vol}, \quad (4.1)$$

avec

---

1. Descriptif de l'expérience page 85.

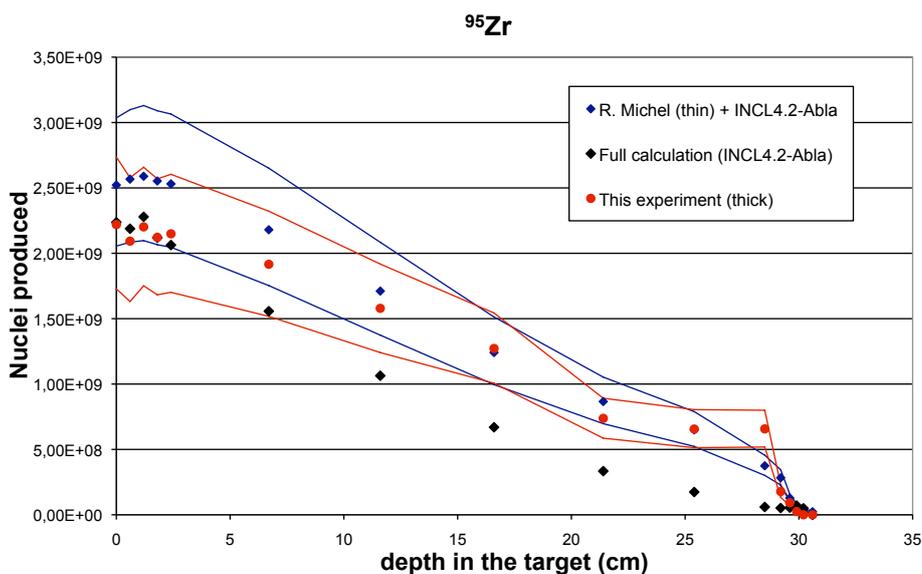


FIGURE 4.1 – Nombre de noyau de  $^{95}\text{Zr}$  produits suivant la profondeur dans une cible de plomb décrite dans la section 2.3.2, page 85. Les points rouges sont les résultats de la mesure, les points bleus sont le résultat de la convolution des sections efficaces élémentaires mesurées par les spectres des particules calculés et les points noirs les résultats uniquement du calcul. Les lignes représentent les incertitudes associées.

$\sigma_{isot}^N(E)$	section efficace élémentaire de production d'un isotope ( <i>isot</i> ) par un nucléon ( <i>N</i> ) d'énergie <i>E</i> pour le matériau cible étudié,
<i>e</i>	épaisseur de l'échantillon de la cible épaisse,
$\rho$	densité volumique du matériau,
$N_a$	constante d'Avogadro,
$M_{mol}$	masse molaire du matériau,
<i>F</i>	fluence de protons incidents,
$\Phi^{(p_p, p_s, n_s)}(E)$	spectres des nucléons ( $p_p$ pour proton incident, $p_s$ et $n_s$ pour proton et neutron secondaire),
$A_{isot}$	activité de l'isotope ( <i>isot</i> ) mesurée dans l'échantillon de la cible épaisse,
$\lambda_{isot}$	constante de décroissance de l'isotope ( <i>isot</i> ),
<i>vol</i>	volume de l'échantillon de la cible épaisse,

et où le terme de droite correspond à la mesure en cible épaisse via l'activité.

À partir des ingrédients à disposition on a obtenu la figure 4.1. On y voit le nombre de noyaux de  $^{95}\text{Zr}$  produits en fonction de la profondeur dans la cible et donné par trois méthodes différentes : i) la mesure de l'activité dans des échantillons de la cible (rouge), ii) la convolution des sections efficaces élémentaires mesurées par les spectres de neutrons et protons calculés (bleu), et iii) le calcul complet (noir). Les incertitudes données par les lignes bleues et rouges sont estimées à partir des incertitudes expérimentales et des interpolations et extrapolations pour le cas ii. En plus du  $^{95}\text{Zr}$ , seuls les  $^{203}\text{Hg}$  et  $^{207}\text{Bi}$  avaient été traités, car les données en neutron incident étaient très rares et peu précises. Pour ces calculs, R. Michel nous avait fourni des valeurs préliminaires.

On voit d'abord que le calcul complet sous-estime le résultat mixte (cas ii), ce qui n'est qu'une conséquence immédiate d'une sous-estimation des sections efficaces élémentaires par le calcul (non-montrées ici). Un fait plus intéressant est

la cohérence entre les mesures en cible épaisse et celles en cible mince (élémentaire). Ceci montre que les spectres calculés sont corrects. De plus ces spectres ne peuvent pas être uniquement obtenus par mesures. La gamme en énergie, le nombre de types de projectiles et le nombre de cibles possibles ne permettent pas d'envisager de tout mesurer.

L'idée première de cette étude avait été d'utiliser ces deux types de données, cible mince (*Thin*) et cible épaisse (*Thick*), pour contraindre le modèle, mais il faut constater que la quantité et la qualité des données expérimentales que l'on peut obtenir ne le permet pas. Il est même assez clair que, si les modèles de spallation permettent de tester notre compréhension du mécanisme de réaction, ils sont tout autant indispensables aux simulations, que ce soit pour les spectres des particules ou les productions de noyaux résiduels avec différents projectiles.

## 4.2 LA SPALLATION DANS L'ESPACE

L'espace est baigné d'un rayonnement, solaire et/ou galactique. Ce rayonnement, dont une partie importante est dans la gamme en énergie des réactions de spallation, interagit avec les matériaux qu'il rencontre et peut tour à tour être néfaste (irradiation lors des missions spatiales) ou source d'informations (étude des météorites). Dans un cas comme dans l'autre les codes de spallation peuvent apporter leur contribution, à condition d'y apporter les améliorations et extensions nécessaires.

Lors des missions spatiales, et notamment les missions habitées, les hommes comme les instruments peuvent subir les effets du rayonnement : lésions du système nerveux central, cataracte, cancer pour les uns et perturbation de l'électronique par une particule isolée (en anglais SEU pour *Single Event Upset*) pour les autres, par exemple. D. Mancusi (Mancusi et al. 2011b) a montré l'importance de la modélisation pour traiter ces problèmes, notamment parce que les blindages mis en place pour protéger induisent des rayonnements secondaires qu'il faut savoir évaluer. Ainsi pour la perturbation de l'électronique (SEU) c'est le code de désexcitation qui est important alors que pour la dose venant des protons c'est le code de cascade qui prédomine. L'étude n'a été faite dans (Mancusi et al. 2011b) que pour des protons incidents, mais l'auteur souligne l'importance des réactions noyau-noyau, ce qui est clairement spécifié aussi dans l'article de S. Pedoux (Pedoux et al. 2011) où l'on peut lire que, si les ions ne représentent que 1% du rayonnement cosmique galactique, ils peuvent être responsables de 64% de la dose équivalente dans certains cas. Cet article reprend d'ailleurs les trois extensions étudiées dans INCL pour l'orienter entre autre vers les questions des radiations dans l'espace, à savoir l'extension en énergie, jusque vers 12 GeV, l'émission des ions légers et la prise en compte des ions légers comme projectiles. L'intérêt d'aller vers de plus hautes énergies est dû au fait que, si le spectre de rayonnement cosmique galactique est maximal vers 1 GeV, il s'étend bien au-delà (figure 3.9 page 99). Cette extension est abordée dans la section suivante 4.3. L'émission des ions légers par le code de cascade est nécessaire si l'on veut prendre correctement en compte la queue de spectre haute énergie des ions légers émis pendant les réactions de cascade et qui peuvent éventuellement induire d'autres réactions. Le groupe a déjà commencé à étudier cette extension (Cugnon et al. 2011) qui maintenant existe dans la version INCL4.6 (détails dans la section 1.3.7, page 32). Enfin l'utilisation des ions légers comme projectile est elle aussi un sujet d'étude dans le groupe. L'idée a d'abord

été de pousser la méthode utilisée pour les composites (d, t,  $^3\text{He}$  et  $\alpha$ ), avec des résultats encourageants (Kaitaniemi et al. 2011). Cependant cette méthode ne traite pas le projectile comme la cible, ce qui rend le système asymétrique et ne permet pas une modélisation complète. Avoir une description symétrique est un projet en cours, aussi poussé par les besoins de l'hadronthérapie. Au sujet des réactions noyau-noyau intéressants à la fois la thérapie et l'espace on peut citer le projet expérimental FIRST (**F**ragmentation of **I**ons **R**elevant for **S**pace and **T**herapy) à GSI dans lequel des expérimentateurs du groupe se sont impliqués et dont des premières mesures ont été prises à l'été 2011.

La spallation dans l'étude des météorites a déjà été abordée au chapitre 3 (3.1.3, page 99). Il a été montré les très nettes améliorations de INCL4.5-Abla07 dans ce domaine pour les protons incidents. Pour les neutrons aussi les résultats sont bons, mais le problème dans ce cas est le manque de données expérimentales. À ce sujet j'avais mentionné la référence (Leya et Michel 2011) pour l'obtention de données expérimentales de sections efficaces de production d'isotopes par un faisceau de neutrons à partir de mesures sur des cibles épaisses, avec la difficulté liée à la déconvolution. Pour anecdote sur les problèmes de déconvolution je citerai aussi le cas de sections efficaces de neutrons et particules légères chargées obtenues avec des neutrons de 175 MeV. L'expérience a été faite à Upsalla et les détails peuvent être lus dans (Bevilacqua 2011). Comme toujours le faisceau n'était pas mono-énergétique, mais les auteurs ont réduit autant que faire se peut la queue des basses énergies. L'autre souci était que les cibles, fer et bismuth, bien que minces, avaient une certaine taille, respectivement 0,375 et 0,500 mm. Nous avons utilisé ces données toutes récentes lors du projet ANDES pour valider nos modèles entre 150 et 600 MeV. Si pour le fer les comparaisons étaient très correctes, pour le bismuth les résultats n'étaient pas bons, notamment pour l' $\alpha$ . Un calcul *réel* avec INCL4.6-Abla07 dans MCNPX, considérant la cible avec son extension géométrique et non pas supposée infiniment mince, comparé aux résultats de mesure non corrigés a permis de montrer que dans ce cas les calculs et les mesures coïncidaient bien et que par conséquent le souci était du côté de la déconvolution. Les auteurs ont trouvé l'erreur et les nouvelles mesures sont maintenant en accord avec les calculs. La figure 4.2 résume la situation avant et après. On voit ainsi tout l'apport des modèles dans le cas des neutrons comme projectiles.

Il reste la question des particules  $\alpha$  comme projectiles, puisqu'ils représentent 12% du GCR. Comme il a été dit au chapitre 3, puisque les données sont très rares et que les modèles pas encore assez développés pour ce type de réactions, il est commun de se rabattre alors sur l'hypothèse que l' $\alpha$  peut être remplacé par deux protons et deux neutrons emportant chacun 25% de l'énergie. Dans (David et al. 2011a) on a montré que la nouvelle version INCL4.5-Abla07, tout en étant loin d'être parfaite, était bien meilleure que l'hypothèse des quatre nucléons. S'il reste encore des progrès à faire, la version INCL4.6 est aussi légèrement meilleure que INCL4.5. La figure 4.3 donne des résultats pour quatre isotopes sur une cible de fer. Il faut préciser ici que le découpage en énergie pour INCL4.6 est plus fin que pour INCL4.5 aux basses énergies. Les isotopes proches en masse et charge de la cible s'analysent plus facilement dans la mesure où les voies pour les obtenir sont très réduites. Ainsi la voie d'obtention du  $^{59}\text{Ni}$  est ici la voie 1n sur le  $^{56}\text{Fe}$ . Dans le cas du  $^{57}\text{Ni}$  ( $^{57}\text{Co}$ ) ce sont les voies 1n (1p) sur le  $^{54}\text{Fe}$  (premier pic) et 3n (1p2n) sur le  $^{56}\text{Fe}$  (second pic). Si les résultats sont corrects pour le  $^{59}\text{Ni}$  et le  $^{57}\text{Co}$ , le calcul surestime nettement le  $^{57}\text{Ni}$ . Il faudra faire une étude détaillée de ces voies pour comprendre ces différences. On peut aussi noter que pour ces

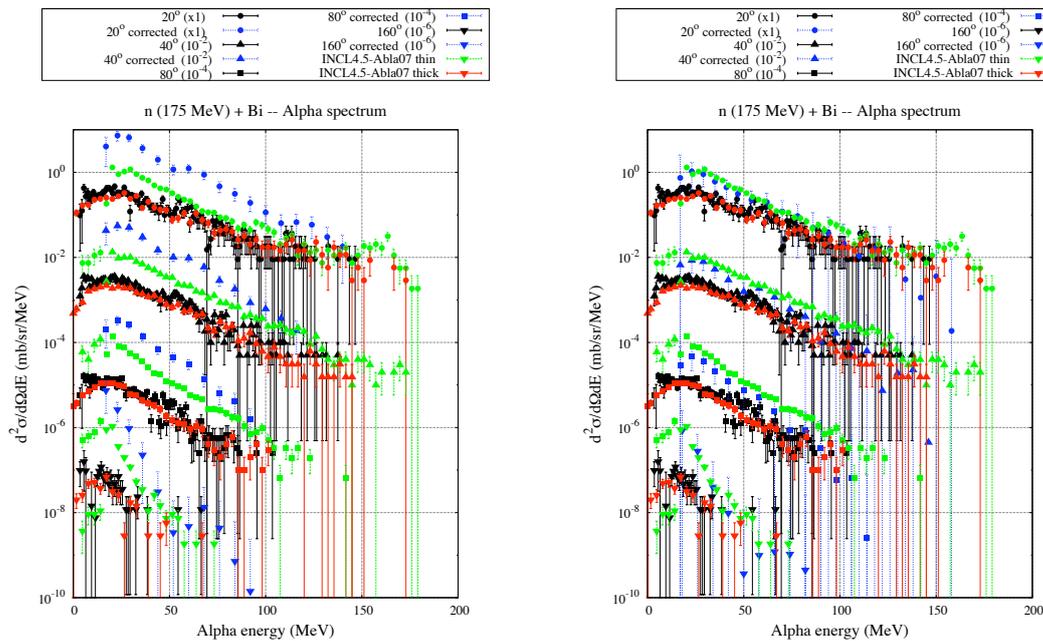


FIGURE 4.2 – Sections efficaces doublement différentielles de production d' $\alpha$  avec des neutrons incidents de 175 MeV sur une cible de Bismuth. Les calculs sont faits avec INCL4.5-Abla07 et les données ont été ou non corrigées de l'épaisseur de la cible. Pour les détails voir la légende. À gauche les premiers résultats et à droite après correction de l'erreur dans la déconvolution de l'épaisseur de la cible.

isotopes l'approximation 2p-2n n'est même pas envisageable. La situation est plus compliquée pour le  $^{51}\text{Cr}$ , car beaucoup plus de voies peuvent y aboutir. Cependant on constate que la forme de la distribution est correcte, mais que le calcul sous-estime d'un facteur 4 ou 5. Pour les  $\alpha$  la situation est donc bien meilleure qu'avant, mais une étude dédiée à ces fonctions d'excitation est nécessaire pour essayer de réduire encore les différences calcul/mesure.

### 4.3 UNE AUTRE DIMENSION : ÉTRANGETÉ ET HYPERNOYAU

La version 4.6 du code de cascade intra-nucléaire INCL est le fruit de nombreuses années d'améliorations pour la compréhension et la simulation des réactions de spallation induites par des nucléons, mésons et composites légers. Elle donne aujourd'hui des résultats tout à fait corrects, notamment avec des protons comme projectiles (voir section 2.2, page 57). Cette version ne considère qu'un seul type de résonance, la  $\Delta(1232)$ , ce qui limite son domaine de validité à des énergies incidentes inférieures à 2-3 GeV. Une version d'INCL, basée sur INCL4.2, a été mise au point pour aller jusqu'à des énergies incidentes de l'ordre de 15 GeV (Pedoux 2011). L'idée maîtresse a été de tenir compte des voies multi-pions, principales nouvelles voies ouvertes à ces énergies, sans passer par la production des résonances au-delà de la  $\Delta(1232)$ . Pour ce faire S. Pedoux et J. Cugnon ont directement paramétré les sections efficaces de production de  $2\pi$ ,  $3\pi$  et  $4\pi$ , avec les énergies et angles d'émission, la voie  $1\pi$  restant elle gouvernée par la  $\Delta(1232)$ . Les résultats obtenus, notamment pour l'émission de  $\pi$  jusqu'à 12 GeV, valident la

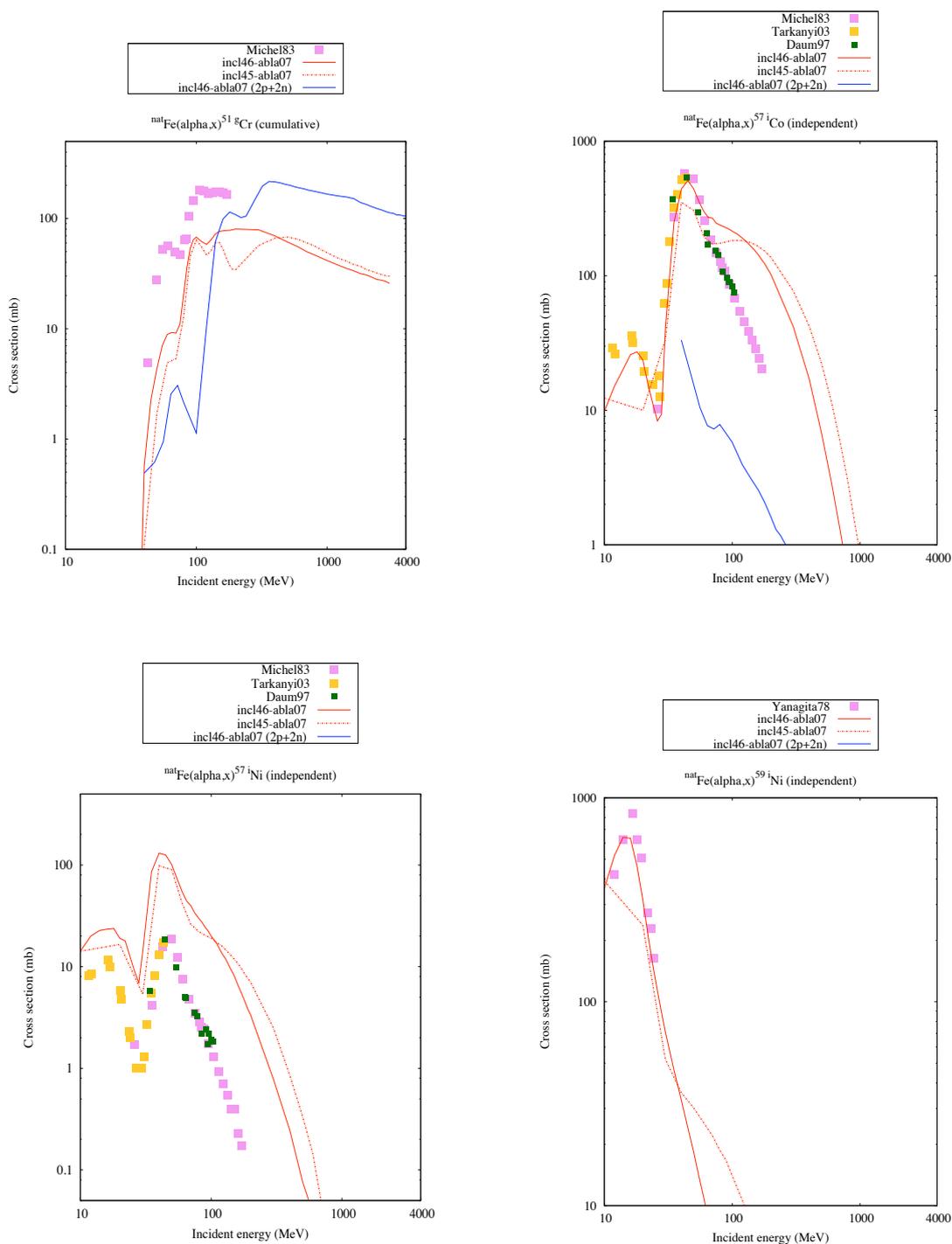


FIGURE 4.3 – Sections efficaces de production sur le fer de  $^{51}\text{Cr}$  (en haut à gauche), de  $^{57}\text{Co}$  (en haut à droite), de  $^{57}\text{Ni}$  (en bas à gauche) et de  $^{59}\text{Ni}$  (en bas à droite) en fonction de l'énergie de l' $\alpha$  incident. Les calculs sont faits avec INCL4.6-Abla07 (rouge plein) et INCL4.5-Abla07 (rouge pointillé-tiré). Les résultats tirés de l'approximation de la brisure de l' $\alpha$  en deux protons et deux neutrons sont donnés par INCL4.6-Abla07 (bleu).

méthode. Cette philosophie avait déjà été mise en pratique une vingtaine d'années auparavant, par J. Cugnon et ses collaborateurs (Cugnon et al. 1990), pour l'étude de la production d'étrangeté par annihilation d'antiproton sur des noyaux. Dans ce cas le nombre de particules à prendre en compte augmente considérablement avec les hypérons, les mésons étranges, mais aussi les autres voies ouvertes pouvant jouer un rôle comme le  $\eta$  et le  $\omega$ . L'étrangeté étant caractérisée par des sections efficaces plus faibles que pour le domaine classique des quarks u et d, il avait été décidé alors d'avoir recours à une version simplifiée du code de cascade (milieu continu avec une frontière franche et un suivi des particules basé sur le libre parcours moyen). Ayant en tête les qualités de INCL4.6, la méthode pragmatique pour prendre en compte des particules d'intérêt, le travail de paramétrage déjà réalisé des sections efficaces utiles dans le cas de la production d'étrangeté (Cugnon et al. 1990) et le fait que la puissance des ordinateurs ne cessent de croître, il devient alors particulièrement tentant aujourd'hui d'étendre INCL4.6 dans le domaine de l'étrangeté.

La formation d'étrangeté dans les noyaux et évidemment des hypernoyaux peut être étudiée avec différents objectifs et être obtenue par divers moyens. Sans chercher à faire une liste exhaustive des objectifs, je mentionnerai certains qui reviennent le plus souvent dans la littérature, à savoir l'énergie de liaison du  $\Lambda$  (l'hypéron le plus léger et le plus à même à former un hypernoyau), la valeur de son puits de potentiel, ses modes de décroissance et notamment par interaction faible, et plus généralement les interactions YN et YY<sup>2</sup>, le taux de formation d'un hypernoyau, son temps de vie et ses modes de décroissance. Pour ce qui est des projectiles utilisés j'évoque ci-après quatre cas, les kaons, les antiprotons, les protons et les photons, avec, juste pour illustrer, un ou deux exemples de ce qui a été fait.

Dans leur article de 1968 A. Lou et D.T. Goodhead (Lou et Goodhead 1968) étudient la production d'hypernoyaux lourds par des  $K^-$  de 800 MeV/c. Ils utilisent le modèle de cascade simplifiée dont l'un d'eux, Goodhead, s'était déjà servi pour une étude similaire avec des  $K^-$  de 6 GeV/c (Evans et Goodhead 1967) et comparent leurs résultats à des expériences. D'une manière générale les comparaisons sont encourageantes et une analyse de la contribution des différentes étapes (capture du  $K^-$ , cascade et évaporation) montre l'importance de la cascade, malheureusement à l'époque trop simplifiée. Ils essaient aussi de tirer, entre autres, l'énergie de liaison du  $\Lambda$  à partir de la distribution en énergie de liaison du proton le moins lié, mais cette dernière trop large induirait trop d'incertitudes. L'utilisation des  $K^+$  est beaucoup moins fréquente du fait notamment d'une interaction  $K^+N$  faible et répulsive. Cette propriété peut toutefois être utilisée pour sonder le noyau plus en profondeur. C'est ce que cherchaient C. B. Dover et P. J. Moffa dans leur article de 1977 (Dover et Moffa 1977) en utilisant un modèle optique. La figure 4.4 tirée de leur article montre clairement la différence des sections efficaces de réaction entre le  $K^-$  et le  $K^+$  dans le cas d'une cible de <sup>12</sup>C.

Pour l'utilisation de l'antiproton je citerai deux articles du tout début des années 90. Le premier est celui déjà mentionné précédemment, la référence (Cugnon et al. 1990). Les antiprotons ont des moments allant jusqu'à 4 GeV/c et différentes cibles sont considérées (du carbone à l'uranium). Les auteurs ont comparé leurs résultats de calculs aux données disponibles (multiplicités et spectres des particules émises en particulier) et pu faire une analyse détaillée. Ainsi, par exemple, ils ont

2. Les faisceaux d'hypérons n'existant pas l'hypernoyau est un laboratoire privilégié pour l'étude de ces interactions.

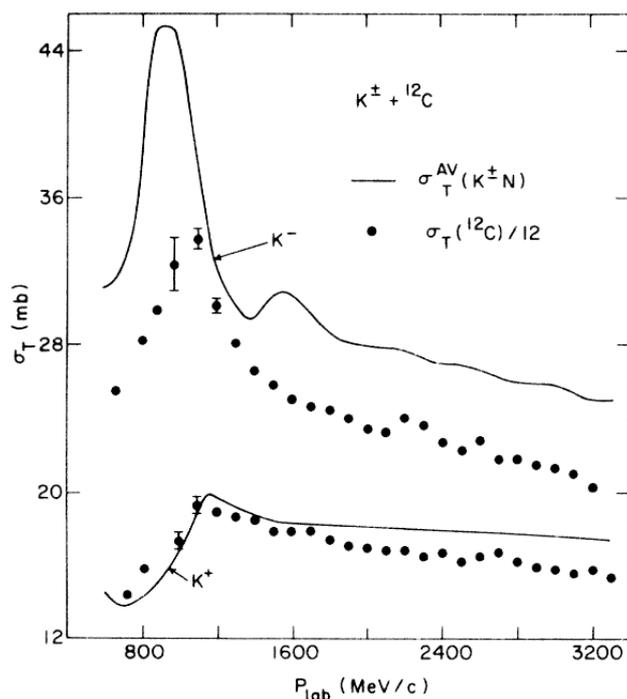


FIGURE 4.4 – Comparaison des sections efficaces totales  $K^\pm + {}^{12}\text{C}$ , divisées par 12, avec celles de  $K^\pm N$ . Cette figure est tirée de (Dover et Moffa 1977).

montré l'importance des réactions secondaires dans le noyau. La figure 4.5 montre dans un cas les différentes contributions à la formation des particules. Si les auteurs ont estimé l'incertitude sur leurs résultats de certaines méconnaissances, comme des valeurs de sections efficaces, ils ont aussi soulevé des approximations faites, comme la non prise en compte du méson  $\rho$ . Pour ce dernier la question du temps d'hadronisation pourrait laisser à penser que son rôle est négligeable. Cependant ce temps n'a pas été étudié par les auteurs. Un autre article (Nifenecker et Malek 1991) traitant de la production d'hypernoyaux par des antiprotons porte sur une étude très différente : le  $\Lambda$  comme marqueur de la dynamique de la fission. Pour résumer, l'expérience PS177 LEAR (Bocquet et al. 1986) a permis de mesurer les temps de vie de la fission retardée (expliquée dans le paragraphe suivant), mais aussi la probabilité que le  $\Lambda$  a de s'attacher à un fragment de fission en fonction de la masse de celui-ci. Suivant d'un côté la forme de cette distribution et de l'autre des hypothèses concernant la dynamique du processus de fission comparée à la vitesse de déplacement du  $\Lambda$  dans le noyau, les auteurs ont montré la nécessité d'un temps de formation d'un col entre les fragments. La sensibilité de leur résultat due aux détails du modèle leur ont laissé à penser que l'étude de la probabilité d'attachement du  $\Lambda$  pourrait être une source d'information sur la transition point selle - point de scission. Une application, suivant le même schéma, pourrait être faite pour la multifragmentation.

À la fin des années 90 la collaboration COSY-13 (Pysz et al. 1999) a mené des expériences avec des faisceaux de protons de l'ordre du GeV sur des cibles de bismuth, uranium et or. L'un des principaux objectifs était la mesure de la durée de vie des hypernoyaux lourds. Au sein de cette collaboration des calculs ont été faits par Z. Rudy (Rudy 1999). Ce dernier n'a pas utilisé un modèle de cascade

	Primordial	Reactions						Final
$\Lambda$	0.013	$\Lambda N \rightarrow \Sigma N$ -0.026	$\Sigma N \rightarrow \Lambda N$ 0.076	$\pi N \rightarrow \Lambda K$ 0.030	$\bar{K} N \rightarrow \Lambda \pi$ 0.046	$\eta N \rightarrow \Lambda K$ 0.007	$\omega N \rightarrow \Lambda K$ 0.004	0.150
$\bar{\Lambda}$	0.013	$\bar{\Lambda} N \rightarrow K n \pi$ -0.011						0.0015
$\bar{K}$	0.178	$\bar{K} N \rightarrow \Lambda \pi$ -0.046	$\bar{K} N \rightarrow \Sigma \pi$ -0.060					0.072
$K$	0.178	$\pi N \rightarrow \Lambda K$ 0.030	$\pi N \rightarrow \Sigma K$ 0.036	$\bar{\Lambda} N \rightarrow K X$ 0.011	$\eta N \rightarrow Y K$ 0.011	$\omega N \rightarrow Y K$ 0.011		0.277
$\pi$	6.50	$\pi N N \rightarrow N N$ -2.94	$\pi N \rightarrow Y K$ -0.066	$\bar{K} N \rightarrow Y \pi$ 0.106	$\eta N \rightarrow \pi N$ 0.072	$\omega N \rightarrow \pi N$ 0.062	$\omega \rightarrow 3\pi$ 0.168	3.676
$\eta$	0.070	$\eta N \rightarrow \pi N$ -0.072	$\eta N \rightarrow \Lambda K$ -0.007	$\eta N \rightarrow \Sigma K$ -0.004	$\pi N \rightarrow \eta N$ 0.123			0.109
$\omega$	0.280	$\omega N \rightarrow \pi N$ -0.062	$\omega N \rightarrow \Lambda K$ -0.004	$\omega N \rightarrow \Sigma K$ -0.008	$\omega \rightarrow 3\pi$ -0.056	$\pi N \rightarrow \omega N$ 0.083		0.232
$\Sigma$	0	$\Sigma N \rightarrow \Lambda N$ -0.076	$\Lambda N \rightarrow \Sigma N$ 0.026	$\pi N \rightarrow \Sigma K$ 0.036	$\bar{K} N \rightarrow \Sigma \pi$ 0.060	$\eta N \rightarrow \Sigma K$ 0.004	$\omega N \rightarrow \Sigma K$ 0.008	0.057
$s(\bar{s})$	0.191	$\pi N \rightarrow Y K$ 0.066	$\eta N \rightarrow Y K$ 0.011	$\omega N \rightarrow Y K$ 0.011				0.279

FIGURE 4.5 – Multiplicités des particules et les différentes contributions pour la réaction  $\bar{p}(4 \text{ GeV}/c)+^{181}\text{Ta}$ . Ce tableau est tiré de (Cugnon et al. 1990).

intra-nucléaire du type INCL, mais un code de type BUU<sup>3</sup>(Wolf et al. 1993), qu'il a étendu à l'étrangeté. On trouve entre autre dans la référence (Rudy 1999) des comparaisons calcul/mesure à la fois pour des spectres d'émissions des  $K^+$ , dont l'auteur s'est servi pour estimer la section efficace élastique  $K^+N$  (voir la figure 4.6), mais aussi pour la section efficace de fission retardée dans le cas de deux réactions,  $p(1.5 \text{ GeV})+^{238}\text{U}$  et  $p(1.9 \text{ GeV})+^{209}\text{Bi}$ . La figure 4.7 donne une vue schématique des différents processus rencontrés dans ces réactions et notamment la fission retardée induite par la désintégration non-mésonique du  $\Lambda$ ,  $\Lambda+N \rightarrow N+N$ , exothermique. Les résultats sont en bon accord avec les mesures expérimentales :  $11 \mu\text{b}$  (calc.) contre  $20 \mu\text{b}$  (exp.) pour  $p(1.5 \text{ GeV})+^{238}\text{U}$  et  $25 \mu\text{b}$  (calc.) contre  $25 \mu\text{b}$  (exp.) pour  $p(1.9 \text{ GeV})+^{209}\text{Bi}$ .

Enfin il y a la voie électromagnétique de production d'étrangeté. Je mentionnerai un article de 2010 de Y. Song et collaborateurs (Song et al. 2010). L'étude a pour but d'une part la mesure au Jefferson Laboratory de la photofission du  $^{209}\text{Bi}$  associée à l'émission de kaon, pion et proton vers l'avant, et d'autre part la confrontation aux résultats de calcul obtenus à l'aide d'un code de type spallation, le code MCMC (*Monte-Carlo MultiCollisional*) (Goncalves et al. 1997). Dans la gamme du GeV la longueur d'onde du photon est de l'ordre des dimensions du nucléon et par conséquent les interactions individuelles prédominent, ce qui justifie l'emploi de modèles du type cascade intra-nucléaire. Malgré l'utilisation d'hypothèses pour palier la non-utilisation d'un code de désexcitation les résultats obtenus sont corrects. Ainsi la probabilité de fission associée à un  $K^+$  mesurée est de 18% et calculée de 15,4%. Pour cette voie il y a bien sûr à prendre en compte la production électromagnétique d'étrangeté d'un point de vue élémentaire. Dans MCMC étendu à l'étrangeté (de Pina et al. 1998) les auteurs utilisent pour cela un paramé-

3. Pour les différences entre les deux types d'approche, se reporter à la section 1.2.1 page 12.

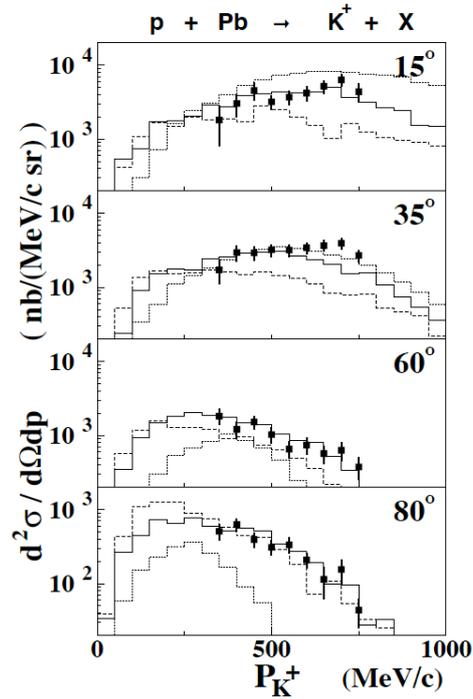


FIGURE 4.6 – Spectres de  $K^+$  calculés pour la réaction  $p+^{208}\text{Pb}$  à 2.1 GeV avec les données expérimentales de (Schnetzer et al. 1989). Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de la section efficace élastique  $K^+N$  : pointillée (0 mb), pleine (10 mb) et tiretée (20 mb). Cette figure est tirée de (Rudy 1999).

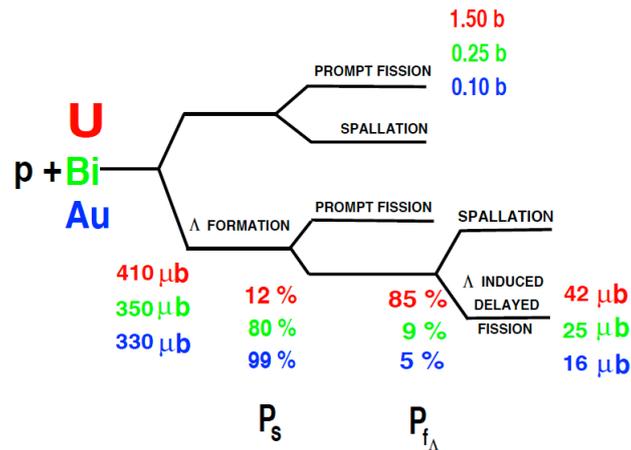


FIGURE 4.7 – Représentation schématique des contributions des différents processus dans les réactions  $p+\text{Au}$ ,  $p+\text{Bi}$  et  $p+\text{U}$  à 1.9 GeV. Les valeurs sont celles obtenues par le code de calcul. Le paramètre  $P_s$  correspond à la probabilité de survie à la fission prompt et le paramètre  $P_{f\Lambda}$  à la probabilité de fission par décroissance non-mésonique. Cette figure est tirée de (Rudy 1999).

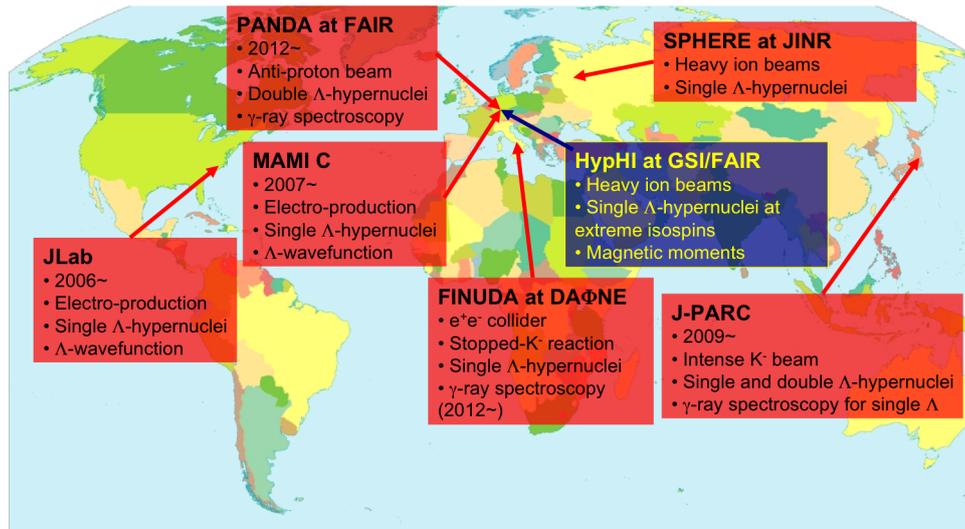


FIGURE 4.8 – Les différentes installations dans le monde où se font ou se feront les études sur les hypernoyaux. Cette figure est tirée d'une présentation de Take R. Saito, de la collaboration HypHI, lors de "The HypHI project at GSI", IX International Conference on Hypernuclear and Strange Particle Physics HYP2006, University of Mainz, Mainz, Germany, October 10th-14th, 2006.

trage basé sur un article de 94 (Bockhorst et al. 1994). Dans le domaine beaucoup de données ont été prises depuis, citons (Glander et al. 2004) pour être en droite ligne avec la référence précédente, et de progrès ont été faits dans la modélisation des interactions élémentaires (Juliá-Díaz et al. 2006).

Si l'on ajoute à ces exemples passés la figure 4.8 qui donne une vision globale des expériences en cours ou prévues à travers le monde sur les hypernoyaux, on voit à la fois tout l'intérêt de l'étude de l'étrangeté dans les noyaux et les possibilités qu'offrent les modèles de spallation. Pour reprendre les cas mentionnés ci-dessus, INCL4.6 ne considère comme projectile que le proton, mais l'antiproton a déjà été utilisé dans une version antérieure (Cugnon et al. 1990), les mésons K ne posent pas plus de problèmes que les pions déjà pris en compte<sup>4</sup> et la voie électromagnétique ne devrait être qu'une question de voie d'entrée avec les interactions élémentaires  $\gamma N$ . Ceci montre le potentiel d'INCL4.6 pour l'étude de l'étrangeté et des hypernoyaux. La phase de désexcitation a été évoquée, mais pas discutée. En fait il faudra bien sûr prendre en compte ces nouvelles particules et étudier comment les incorporer. Certains auteurs considèrent que l'on peut négliger leur évaporation (Song et al. 2010). Dans le cas contraire il faut bien sûr se prémunir des sections efficaces de capture et des densités de niveau décrites dans la section 1.2.2, page 19. Pour finir il reste à préciser que ces modèles de spallation ne peuvent cependant pas servir à l'étude spectroscopique des hypernoyaux. Dans ce cas des descriptions plus analytiques sont utilisées que ce soit pour la voie électromagnétique (Motoba et al. 2010) ou avec des antiprotons (Cugnon et al. 2000).

4. Bien entendu, suivant le raffinement souhaité, du travail peut être encore à faire. Ainsi le pion avait d'abord été mis sans potentiel dans INCL4.2, alors que INCL4.6 le prend en compte.

## CONCLUSION DU CHAPITRE

Si pour les réactions de basses énergies, comme la fission des actinides induites par neutrons thermiques ou rapides, les évaluateurs peuvent se servir des données expérimentales comme piliers pour couvrir l'ensemble du domaine, cela est difficilement possible en ce qui concerne les réactions de spallation : gamme en énergie trop grande, nombre de cibles trop important, voies de sortie trop nombreuses et faisceau de projectile pas toujours aisé à produire (neutrons mono-énergétiques). Les piliers ne sont plus que des points de repères. La modélisation est donc toujours un passage obligé de l'utilisation des réactions de spallation.

La qualité des modèles, et notamment INCL4.6 et Abla07, est devenue tout à fait correcte pour la spallation induite par proton. Des améliorations sont toujours possibles, mais j'en retiendrai trois qui semblent les plus prometteuses. La première concerne l'énergie du projectile (extension à  $\sim 15$  GeV), la deuxième les voies de sorties (ouverture de l'étrangeté) et la dernière la voie d'entrée (ions légers incidents).

La montée en énergie est à la fois utile pour la bonne prise en compte des particules émises dans certaines installations et aussi pour couvrir plus largement le spectre GCR. L'étude a déjà été faite dans INCL4.2 et devra être portée dans INCL4.6, en tirant parti des améliorations, mais en devant peut-être aussi les prendre en compte<sup>5</sup>.

La création de particules étranges dans le noyau et l'apport à l'étude des hypernoyaux sont à la fois tout à fait d'actualité et à la portée d'INCL4.6, du moins pour le cas des protons incidents. L'utilisation d'autres projectiles est envisageable à plus long terme, car les difficultés ne semblent a priori pas très importantes.

Enfin, l'extension du modèle à des projectiles plus lourds, comme les ions légers, est poussée par des domaines aussi différents que l'hadronthérapie et les effets du GCR sur les missions spatiales.

---

5. Des ingrédients plus sophistiqués dans 4.6 pourraient obliger à modifier certaines hypothèses ou façons de paramétrer. Les potentiels des pions devront être pris en compte maintenant, par exemple.

# CONCLUSION GÉNÉRALE

Au cours de ce mémoire, j'ai abordé la spallation sous l'angle de la **modélisation**, de l'observation aux outils de simulations en passant par diverses représentations des réactions nucléaires, puis j'ai détaillé deux domaines dans lesquels je me suis beaucoup impliqués et qui sont les **validations** (ou *benchmarks*) et **l'utilisation des modèles** pour des projets mettant en jeu ces réactions de spallation, et enfin j'ai traité des **futurs travaux possibles** de et avec la spallation.

Je n'ai pas présenté les sujets de manière chronologique, mais plutôt thématique, de façon à faire ressortir la cohérence et parce que la recherche est fait d'aller-retour. De plus ce ne sont pas seulement des résultats que j'ai voulu montrer, mais aussi et peut-être surtout une approche et des objectifs. Ainsi ce travail autour de la spallation est un exemple de l'apport de la recherche fondamentale au sens des outils, des résultats et de la manière de pensée pour décrire de manière la plus complète possible un type de réaction, ceci menant à un état des lieux de la connaissance effective et à la mise à disposition de cette dernière pour une utilisation pluridisciplinaire et macroscopique.

Plutôt que reprendre ou résumer les conclusions de chacun des quatre chapitres, les intéressés peuvent s'y reporter (pages 51, 90, 121 et 134), je préfère faire le point, fin 2012, des travaux possibles à venir. INCL4.6, dont l'article décrivant la physique est en cours de soumission, devrait être implanté dans MCNP6 dans les mois à venir, les développeurs de PHITS souhaitent en faire leur modèle de cascade intra-nucléaire par défaut, ceux de GEANT4 sont intéressés par les développements hautes énergies ( $\sim 10$  GeV), tout comme ceux de MARS qui poussent aussi à l'inclusion des particules étranges. L'utilisation de INCL4.6, associé à Abla07, dans MCNP6 intéressent des chercheurs de PSI, notamment pour comprendre le niveau de Po mesuré dans une cible de spallation de Pb qui est plus élevé que ce que les modèles prédisaient (cf. performance de INCL4.6 sur la production d'At par du Bi (section 3.2.2, page 116)), ainsi que des chercheurs de l'université de Bern pour les études de météorites (cf. section 3.1.3, page 99).

INCL4.6 est demandé et ses axes de développements encouragés. Des ions comme projectiles aux particules étranges considérées en passant par les voies multiples, du codage en fortran et/ou en C++, des validations qui seront nécessaires et des applications qui s'en suivront, les activités ne manqueront pas, et des priorités seront à décider.

Ah oui, le titre ! Il y a bien des façons de l'aborder, d'y répondre. Chacun se fera son idée avant ou après avoir lu ce mémoire. A priori, si l'on a compris, l'on peut prédire et, si l'on a prédit, c'est que l'on a compris. Cela n'est strictement vrai que dans des cas très restreints. Plus le phénomène est complexe, la spallation l'est, plus la compréhension totale, absolue est difficile (voir section 2.2, page 57), et la notion de prédiction est intimement liée à la précision que l'on souhaite. De l'autre côté une prédiction correcte peut être seulement due à la bonne connaissance, éventuellement empirique, du petit domaine considéré. Il faut ajouter que,

avec toutes les nuances qui s'imposent, comprendre et prédire ne participent pas de la même aspiration. Dans le chapitre 1 cela a été évoqué avec l'objet de l'étude qui devient outil. Il y a d'un côté la satisfaction de saisir le sens de ce qui se passe, et de l'autre, celui de coller, au mieux..., à la réalité observée. Essayer d'embrasser les deux est très enrichissant, mais relève souvent du grand écart.

# ANNEXES

# A

## A.1 QUELQUES FIGURES DU CHAPITRE 2.

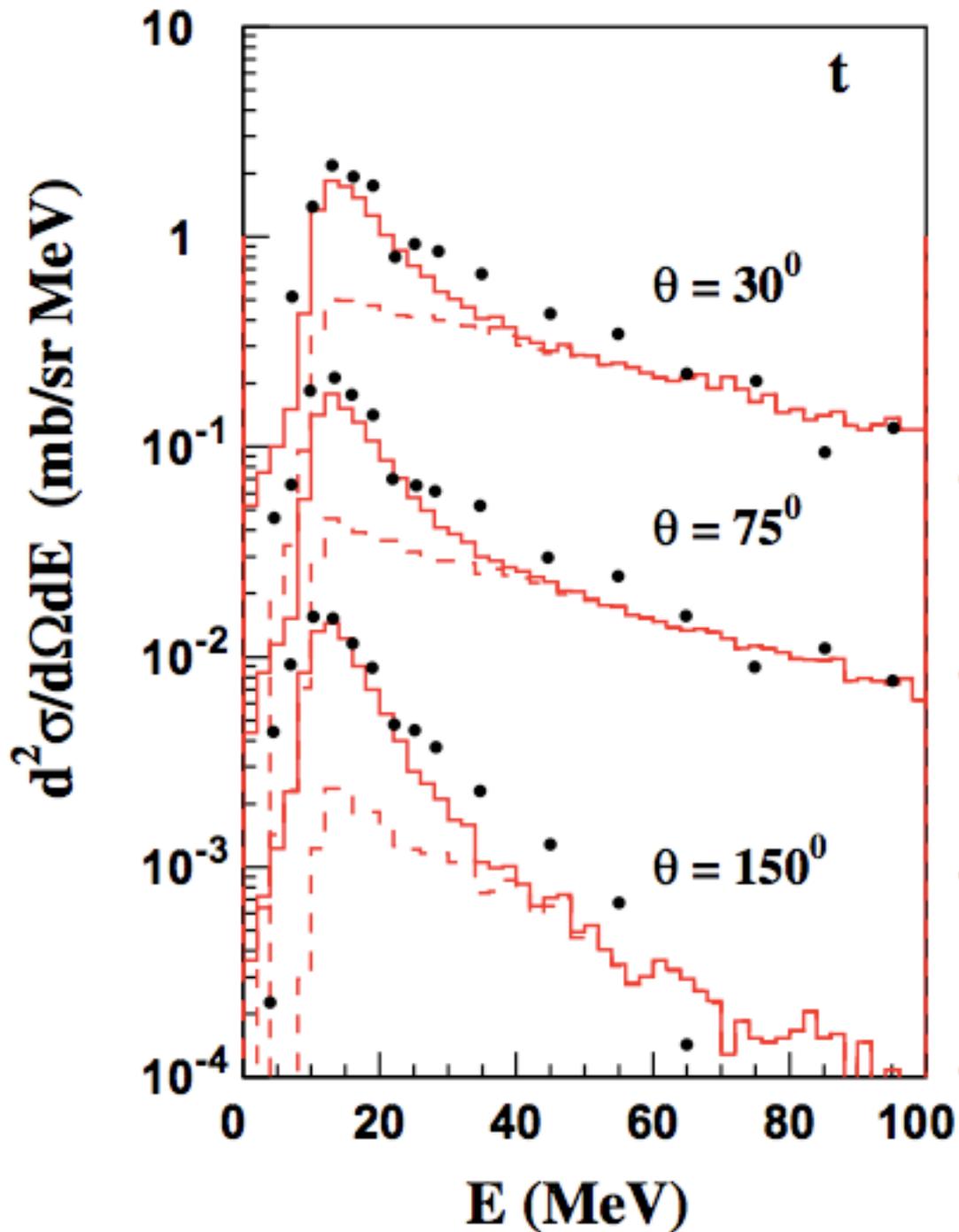


FIGURE A.1 – Sections efficaces doublement différentielles de production de tritium dans la réaction  $p + \text{Ta}$  à 1.2 GeV. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-Abla07 (courbe pleine) et de INCL4.5 seul (courbe tirée). Des facteurs multiplicatifs différents ont été affectés aux différents angles pour des raisons de clarté. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010).

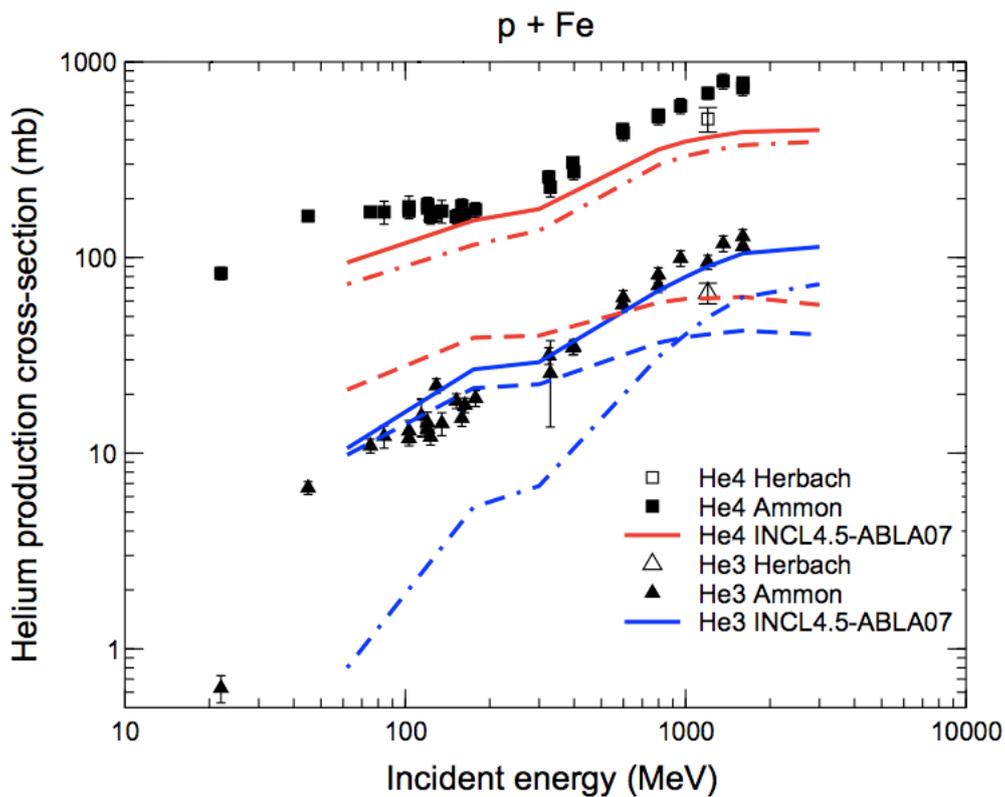


FIGURE A.2 – Sections efficaces de production d' $^3\text{He}$  (courbes bleues) et  $\alpha$  (courbes rouges) par des protons sur le fer. Les données (points noirs) ont été mesurées par (Herbach et al. 2006) et (Ammon et al. 2008), et les résultats de calculs sont ceux de INCL4.5-ABLA07. Les courbes pleines représentent le résultat total, les courbes tiretées la contribution d'INCL4.5 et les courbes point-tiret la contribution d'Abla07. Cette figure est tirée de (Leray et al. 2010).

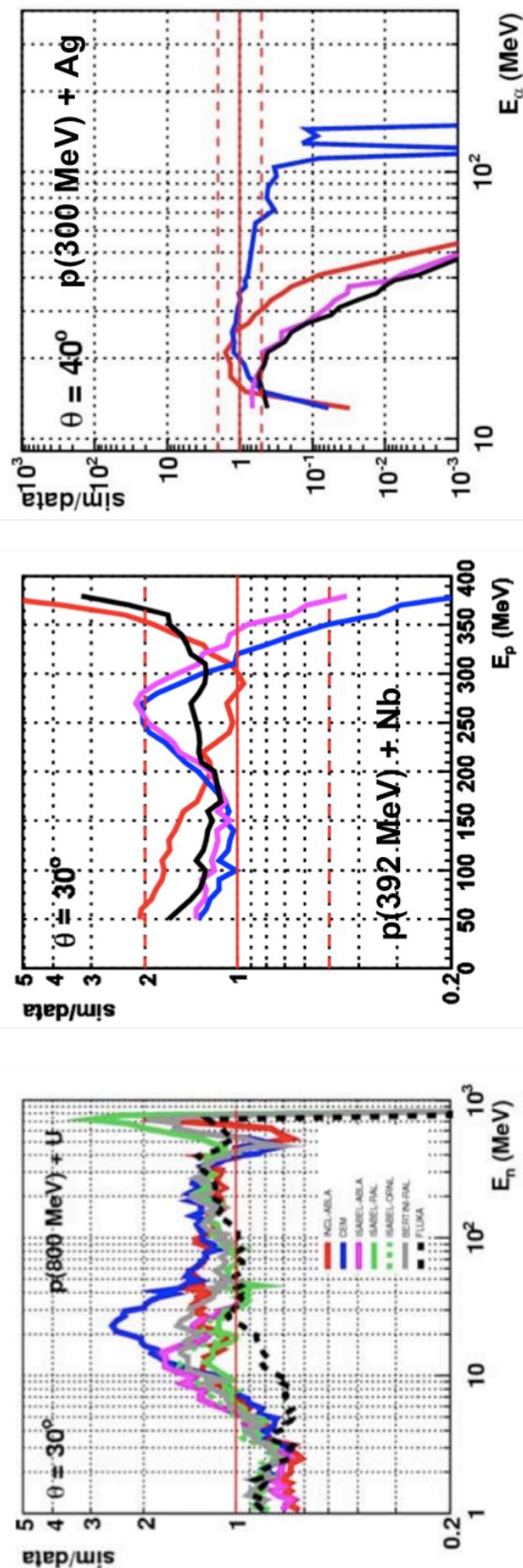


FIGURE A.3 – De gauche à droite les rapports calcul/mesure pour des spectres en angle et énergie de neutrons, protons et  $\alpha$  aux alentours de  $30^\circ$ . Les cibles et les énergies de projectiles sont différentes pour des raisons de disponibilités de données expérimentales. Ces figures sont tirées de (Rapp et al. 2006).

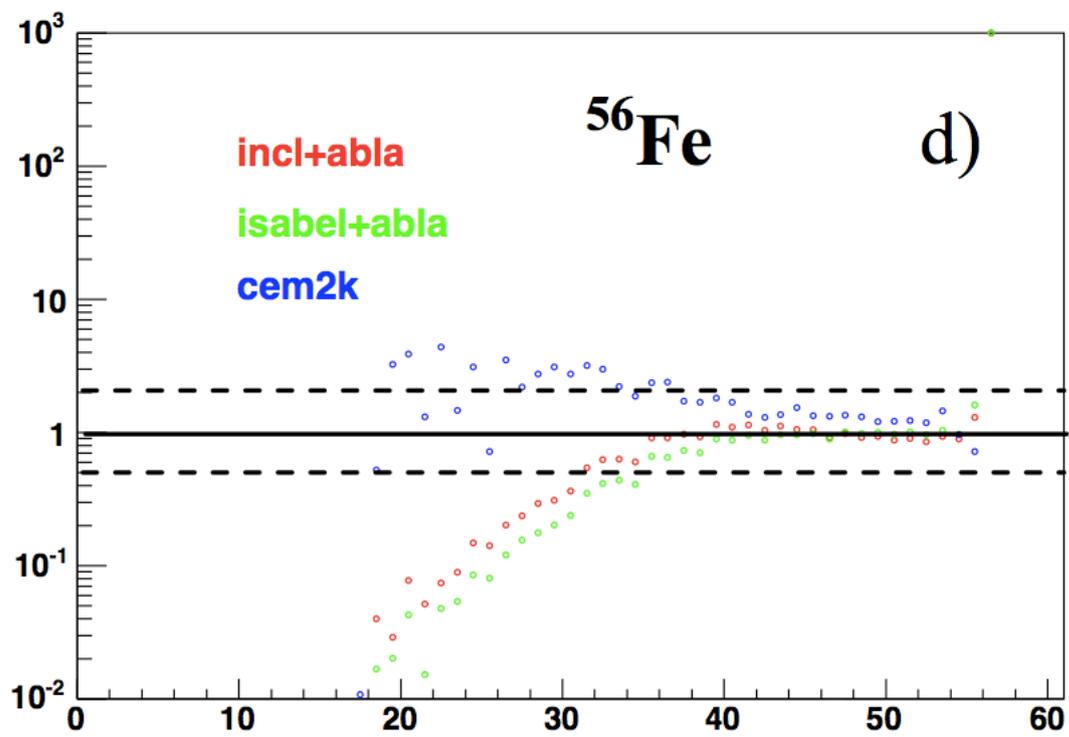


FIGURE A.4 – Les rapports calcul/mesure pour la distribution en masse des noyaux résiduels produits par la réaction  $^{56}\text{Fe}(1\text{A.GeV}) + p$ . Cette figure est tirée de (David et al. 2007a).

Codes	Representatives	Neutron	Neutron Multiplicity	Light Charged Particles	Pion	Residue	Excitation Function
cem03-02	A. Sierk, S. Mashnik K. Gudima, M. Baznat						
cem03-03	K. Gudima, M. Baznat S. Mashnik, A. Sierk						
cascade-04	H. Kumawat						
phits-jam	N. Matsuda						
phits-bertini	N. Matsuda						
phits-jqmd	N. Matsuda						
isabel-smm	D. Mancusi						
isabel-gemini++	D. Mancusi						
geant4-bertini	Geant4 Hadronic Group						
geant4-binary	Geant4 Hadronic Group						
cascade-asf	A. Konobeyev						
incl4.5-ablo7	D. Mancusi						
incl4.5-smm	D. Mancusi						
isabel-ablo7	D. Mancusi						
incl45-gemini++	D. Mancusi						
cascade-x	Yu. Korovin						
mcpnx-bert	F. Gallmeier						

FIGURE A.5 – Liste des participants et des calculs fournis suivant les observables. La couleur verte indique que les calculs ont été fournis pour l'observable et la couleur rouge qu'ils n'ont pas été fournis. Cette figure est tirée du site web AIEA <http://www-nds.iaea.org/spallations/>.

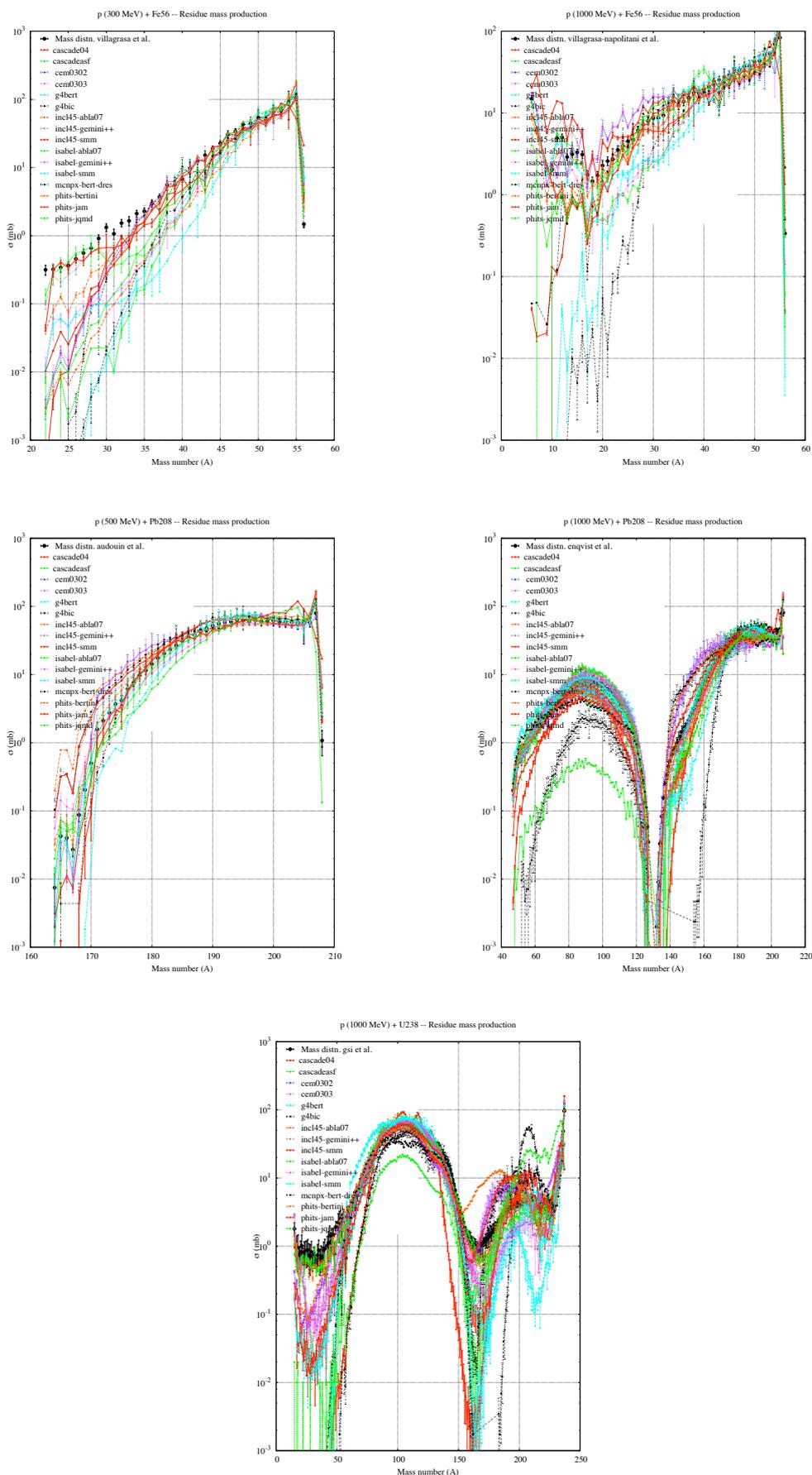


FIGURE A.6 – Distributions en masses obtenues par les modèles. En haut avec le fer (gauche : 300.A MeV; droite : 1000.A MeV). Au milieu avec le plomb (gauche : 500.A MeV; droite : 1000.A MeV). En bas avec l'uranium à 1000.A MeV

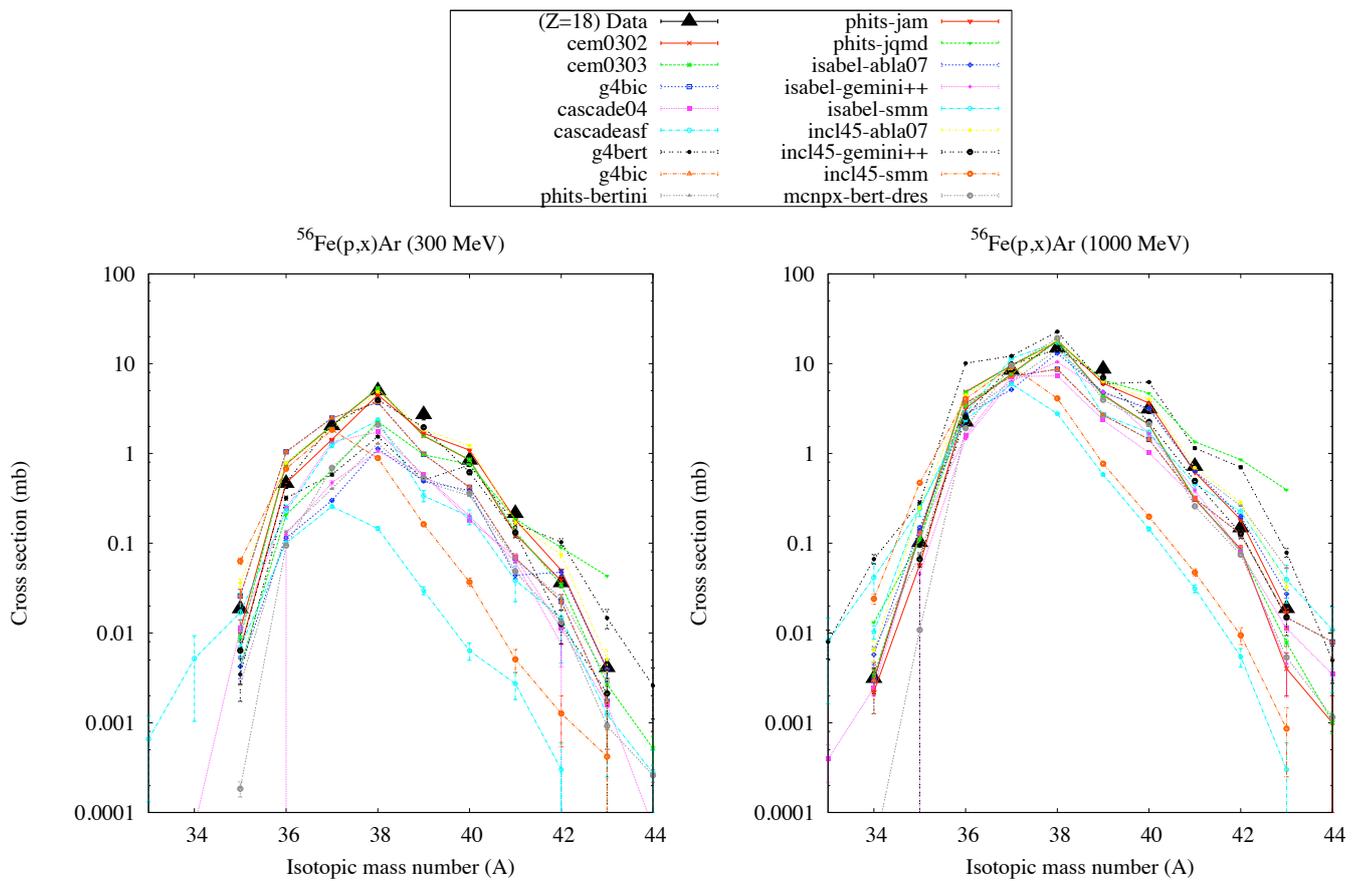


FIGURE A.7 – Distributions en masses de l'isotope Argon dans les réactions  $\text{Fe}+p$  à  $300.A$  MeV (gauche) et  $1000.A$  MeV (droite) par tous les modèles.

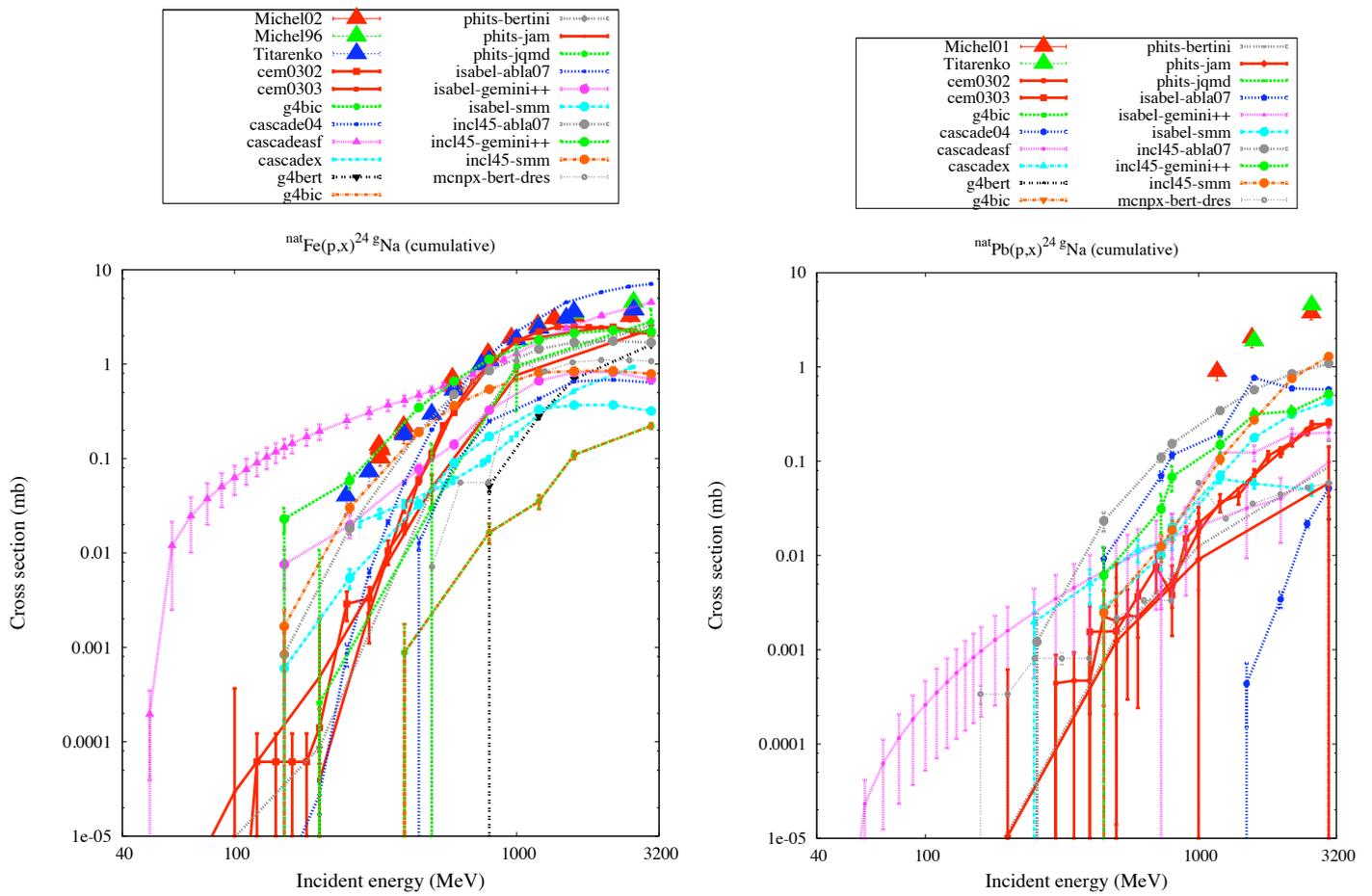


FIGURE A.8 – Fonctions d'excitation du  $^{24}\text{Na}$  pour les réactions  $p+\text{Fe}$  (gauche) et  $p+\text{Pb}$  (droite).

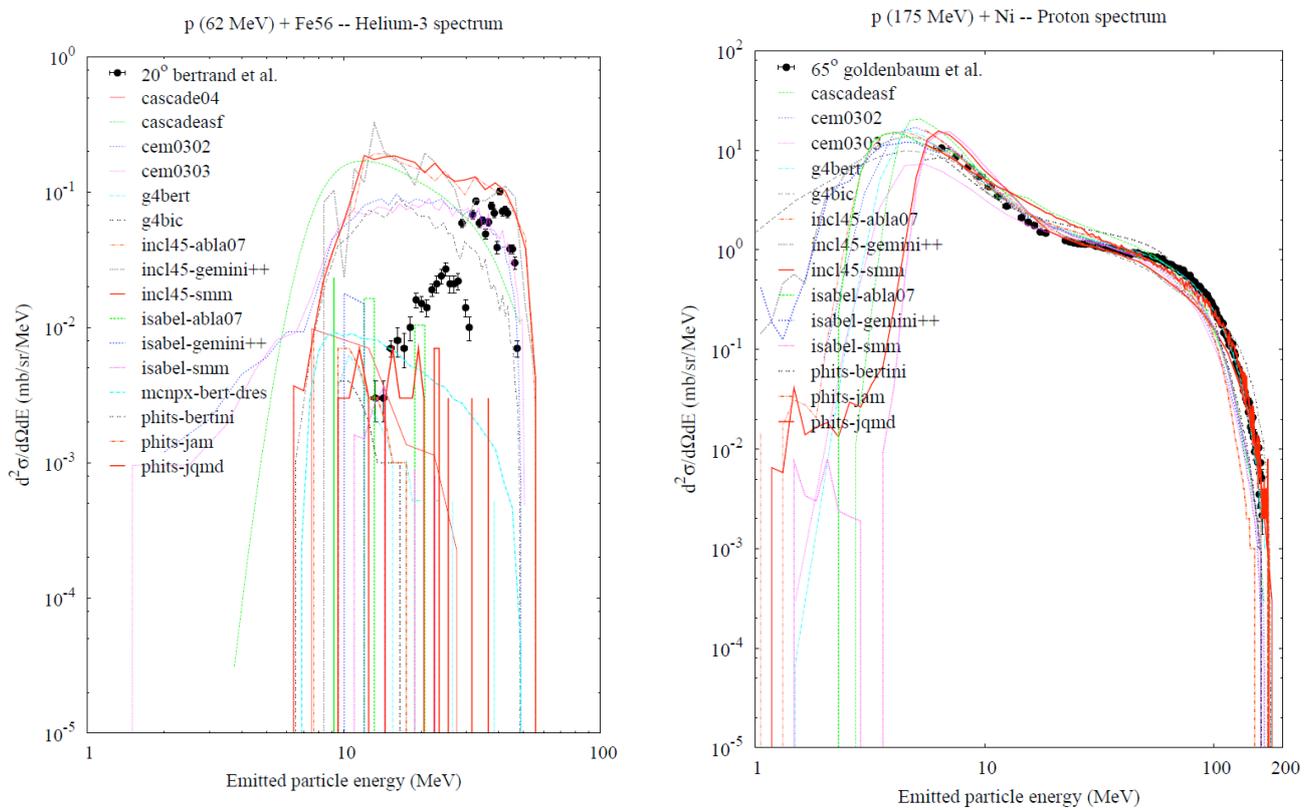


FIGURE A.9 – Les meilleurs et pires résultats obtenus globalement par les modèles pour l'émission de particules légères chargées. A gauche, le pire cas avec les spectres doublement différentiels  $d^3\text{He}$  dans la réaction  $p(62\text{ MeV}) + {}^{56}\text{Fe}$ , et à droite le meilleur cas avec les spectres doublement différentiels de proton dans la réaction  $p(175\text{ MeV}) + \text{Ni}$ .

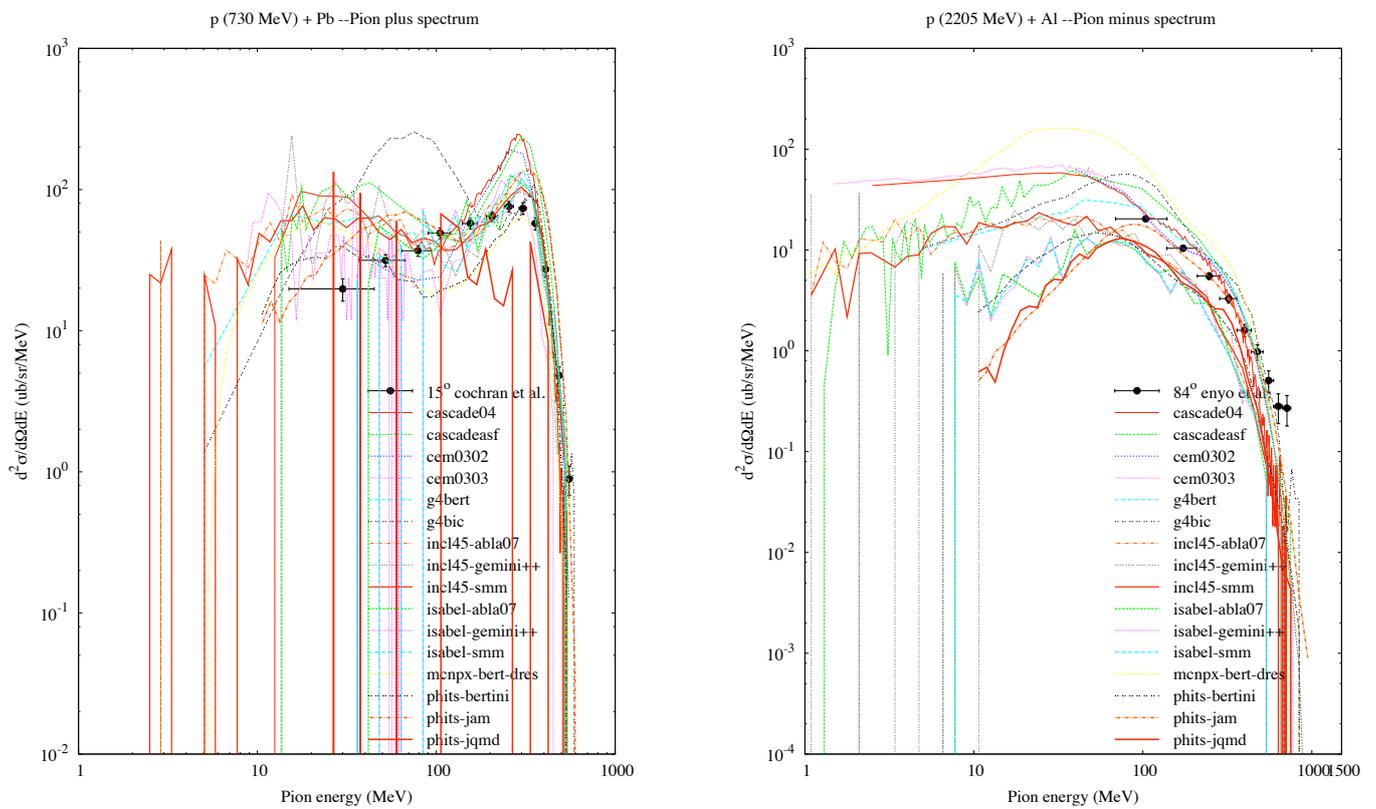


FIGURE A.10 – Spectres doublement différentiels de pions. A gauche, production de  $\pi^+$  à  $15^\circ$  dans la réaction  $p(730\text{MeV})+\text{Pb}$  et, à droite, production de  $\pi^-$  à  $84^\circ$  dans la réaction  $p(2205\text{MeV})+\text{Al}$

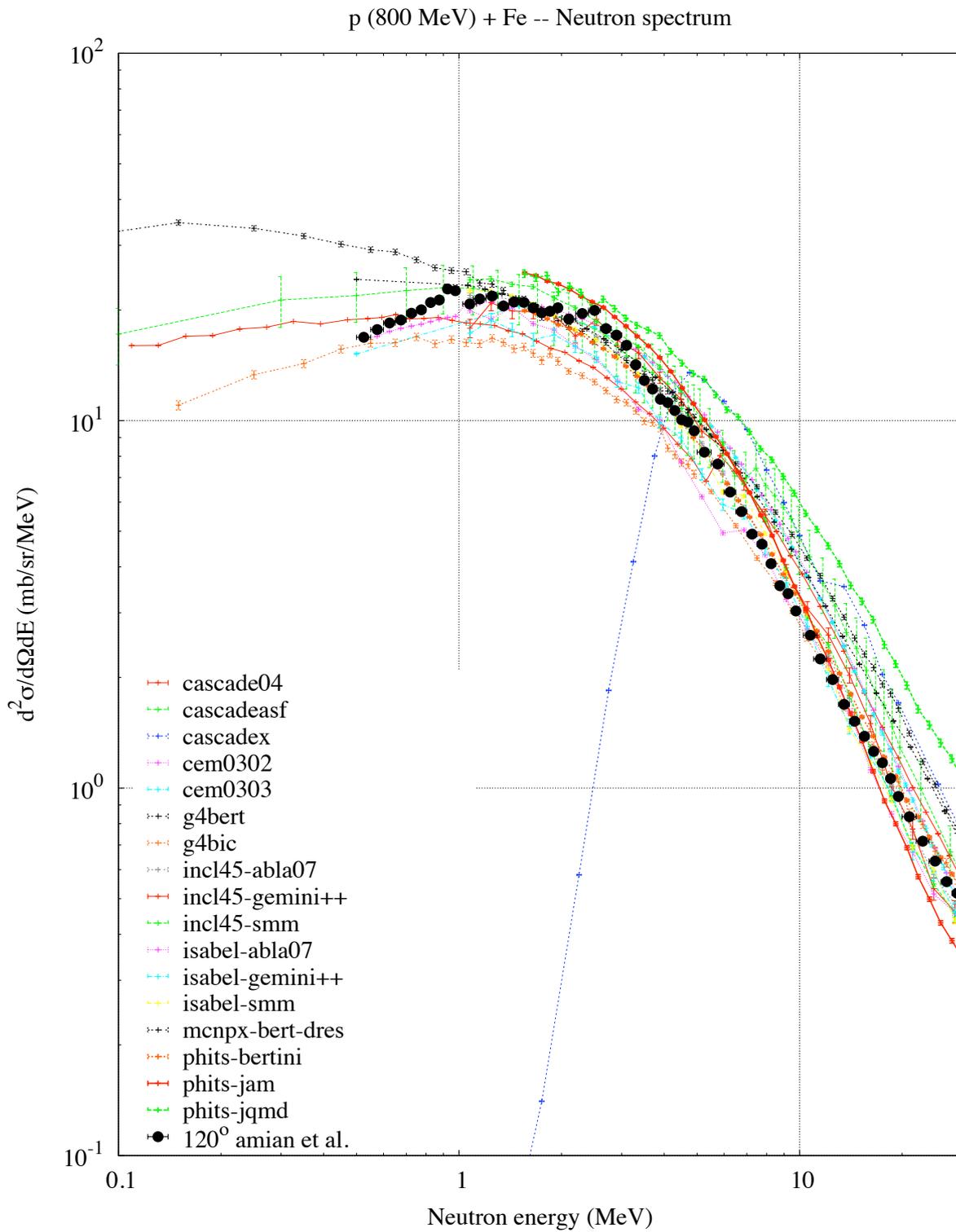


FIGURE A.11 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à 120° dans la réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie basse énergie.

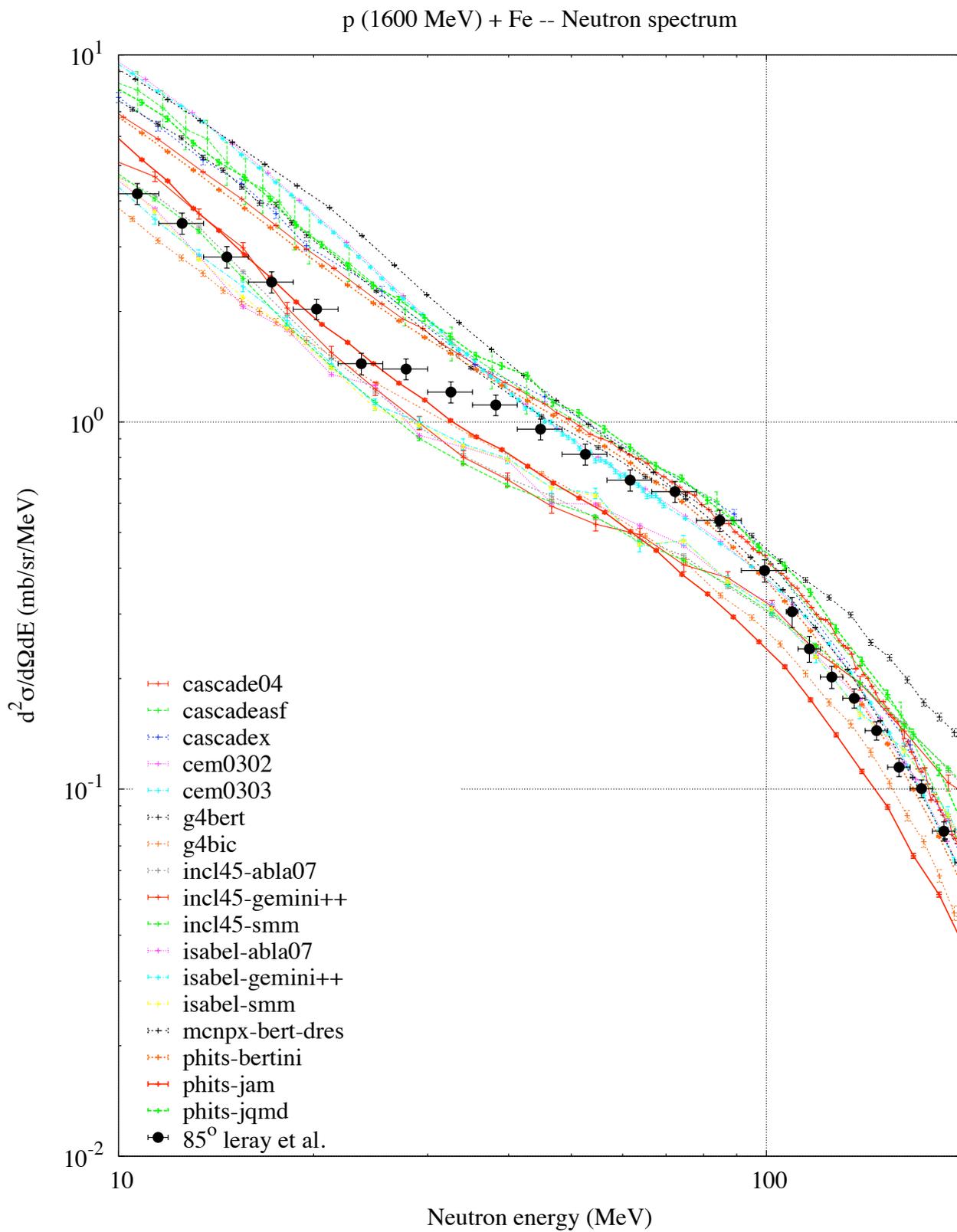


FIGURE A.12 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à 85° dans la réaction  $p(1600\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie énergie intermédiaire (20-150 MeV).

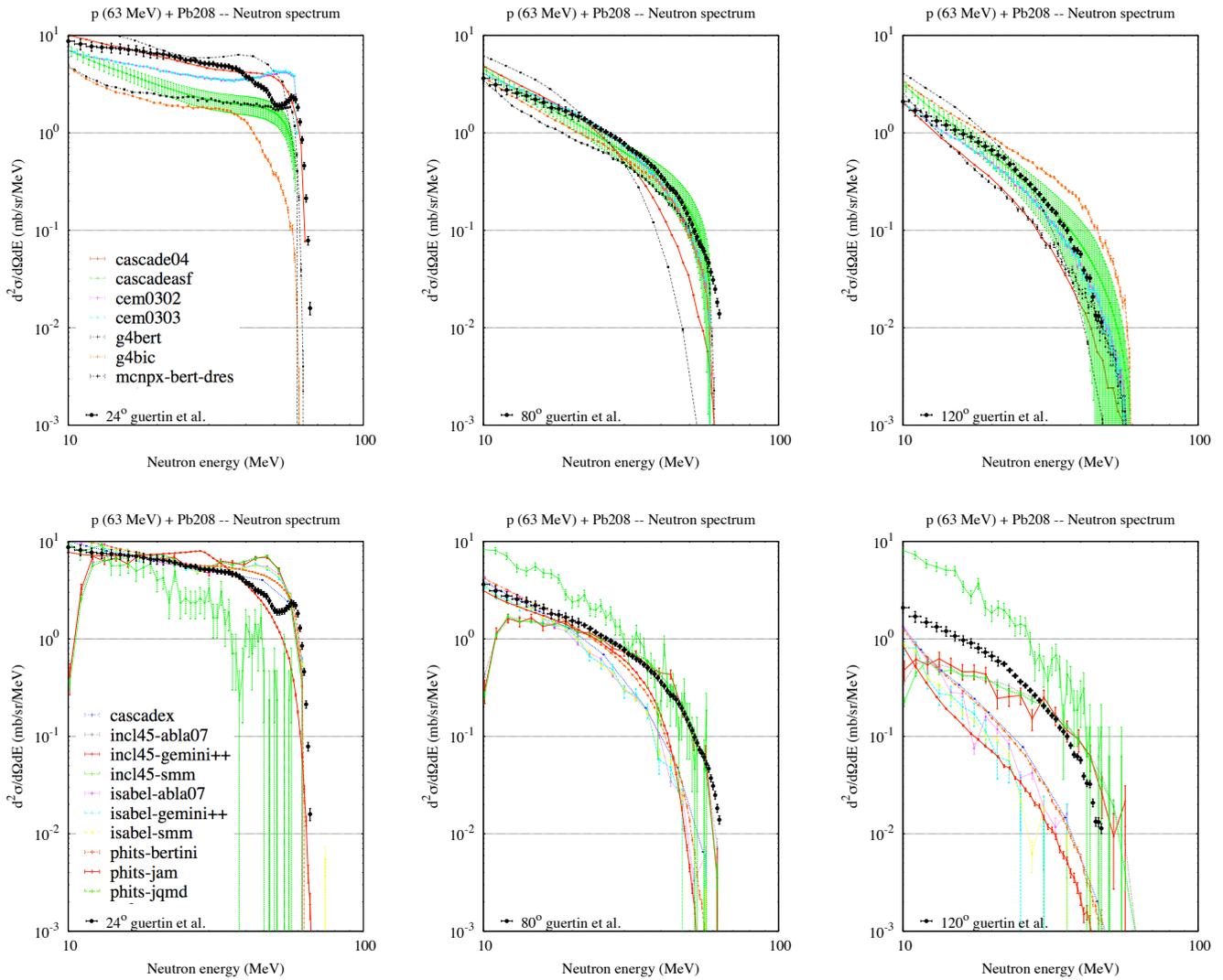


FIGURE A.13 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles (24° à gauche, 80° au centre et 120° à droite) dans la réaction  $p(63\text{MeV})+\text{Pb}$ . Les figures du haut concernent les modèles incorporant une phase de pré-équilibre et les figures du bas les modèles n'incorporant pas une phase de pré-équilibre.

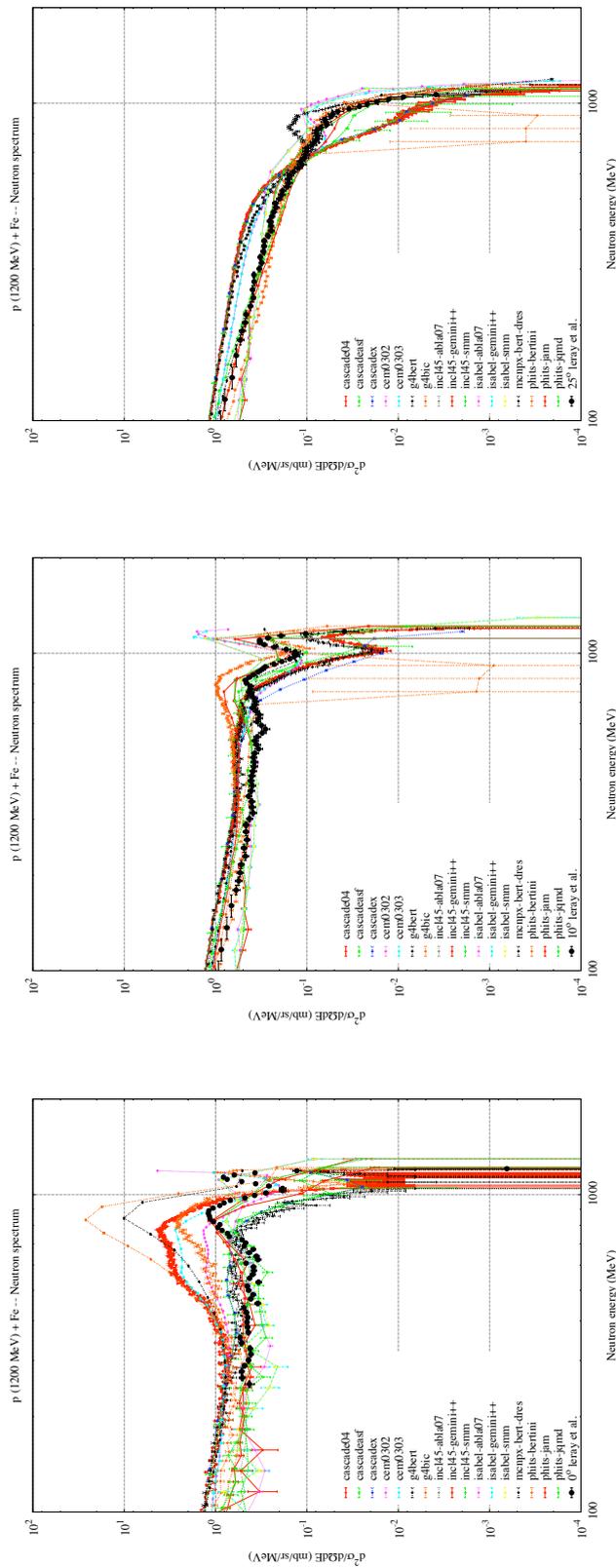


FIGURE A.14 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons à trois angles avant ( $0^\circ$  à gauche,  $10^\circ$  au centre et  $25^\circ$  à droite) dans la réaction  $p(1200\text{MeV})+\text{Fe}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ )

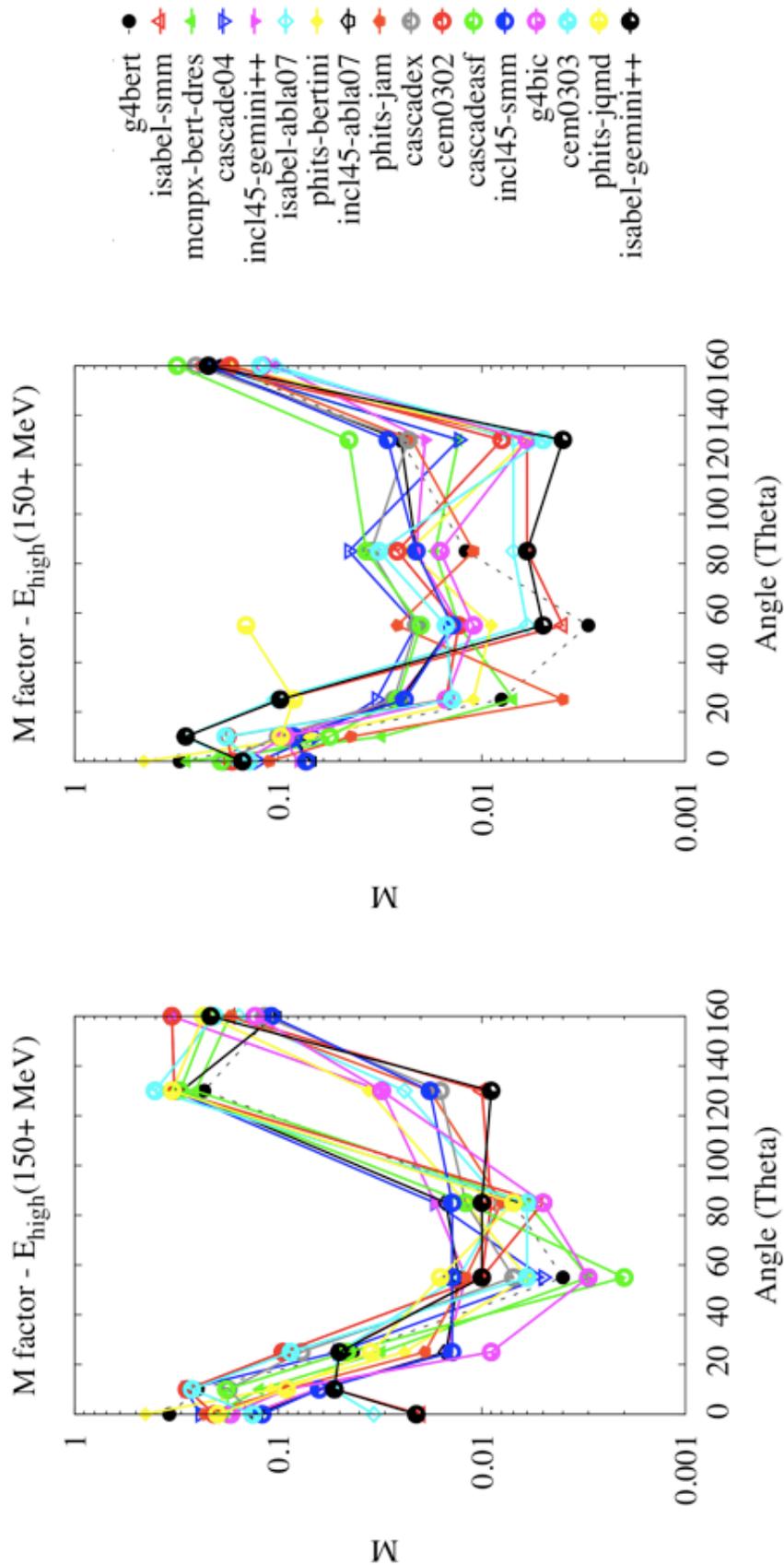


FIGURE A.15 – Distributions angulaires du facteur de déviation (ou FoM)  $M$  (décrit page 87) pour les réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$  et  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$ . Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150\text{ MeV}$ )

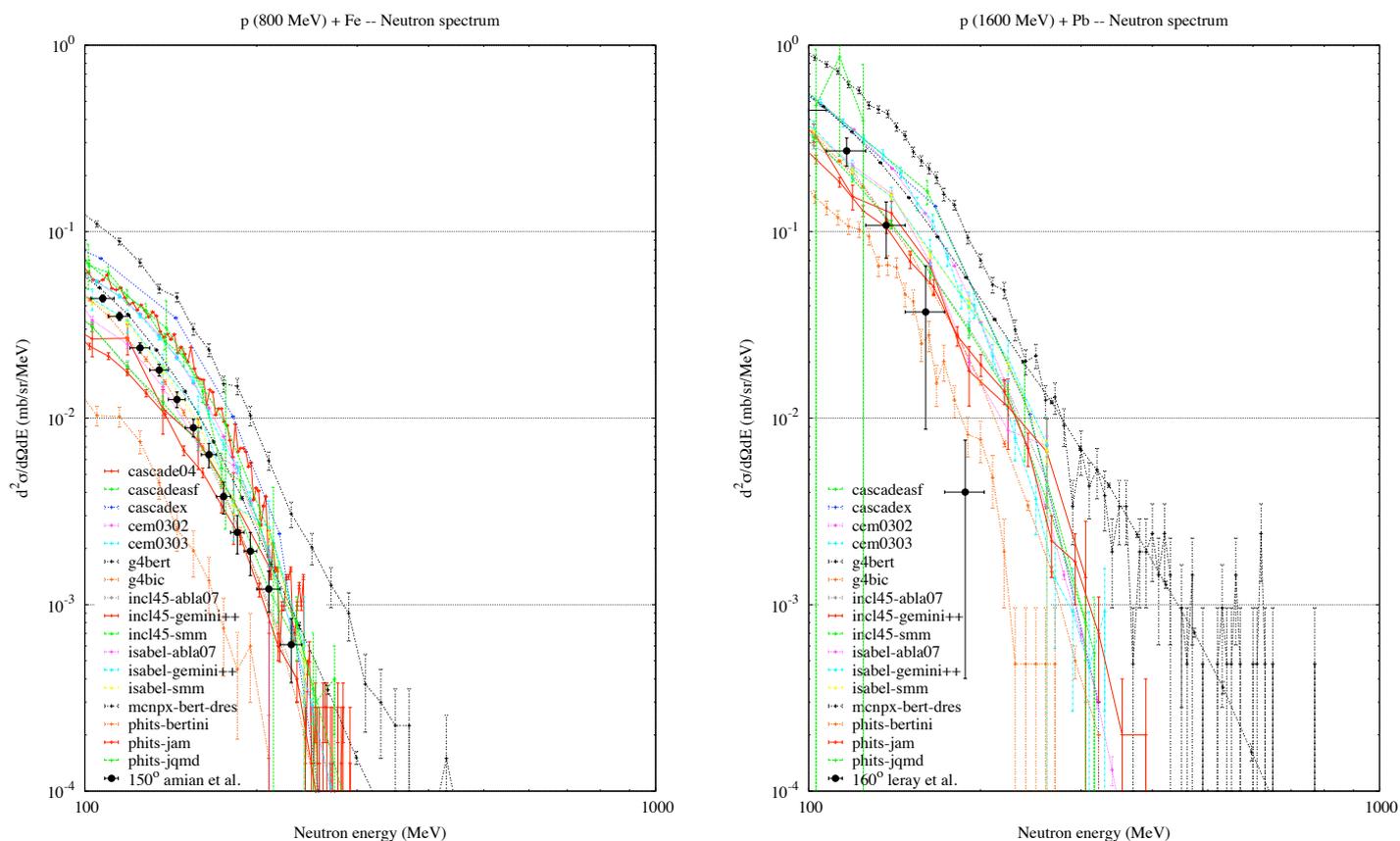


FIGURE A.16 – Spectres doublement différentiels de production de neutrons aux angles arrières. À  $150^\circ$  dans la réaction  $p(800\text{MeV})+\text{Fe}$  (à gauche) et  $160^\circ$  dans la réaction  $p(1600\text{MeV})+\text{Pb}$  (à droite). Focalisation sur la partie haute énergie ( $\geq 150$  MeV)

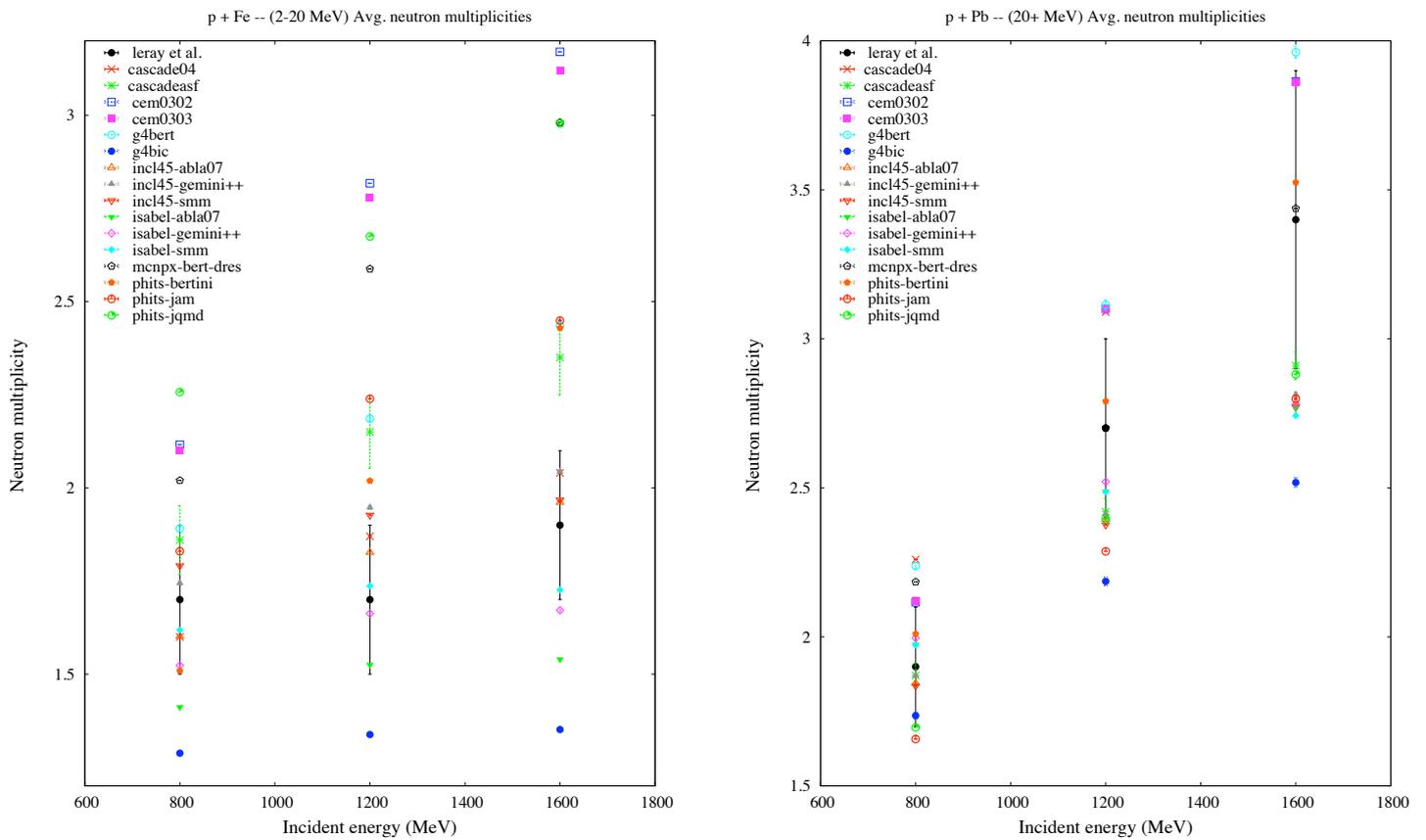


FIGURE A.17 – Multiplicités moyennes de neutrons. À gauche, pour des neutrons de basses énergies (entre 2 et 20 MeV) dans les réactions  $p(800 \text{ MeV})+Fe$ ,  $p(1200 \text{ MeV})+Fe$  et  $p(1600 \text{ MeV})+Fe$  et, à droite, pour des neutrons de hautes énergies ( $\geq 20 \text{ MeV}$ ) dans les réactions  $p(800 \text{ MeV})+Pb$ ,  $p(1200 \text{ MeV})+Pb$  et  $p(1600 \text{ MeV})+Pb$ .

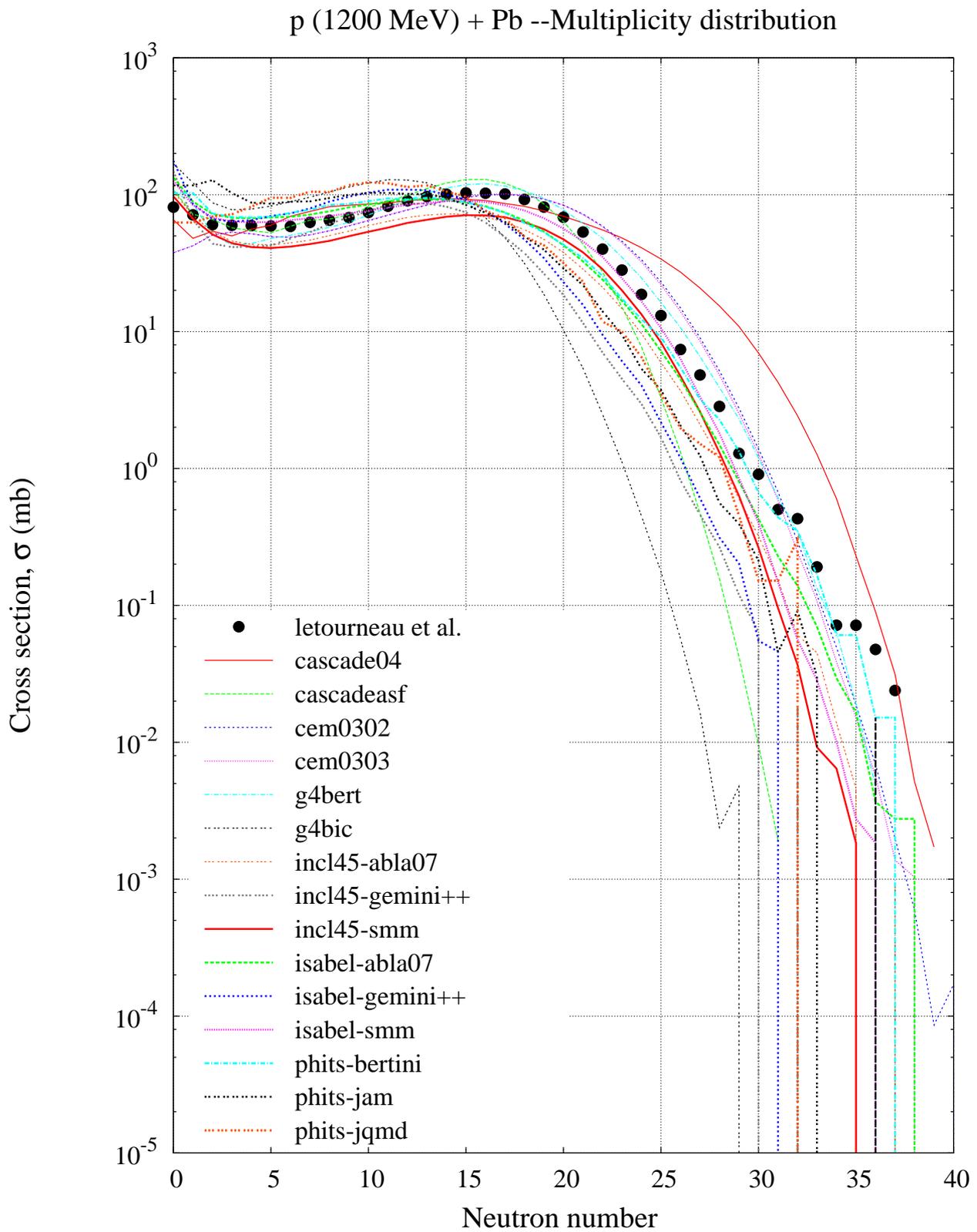


FIGURE A.18 – Distribution de multiplicités de neutrons dans la réaction  $p(1200 \text{ MeV})+Pb$ .

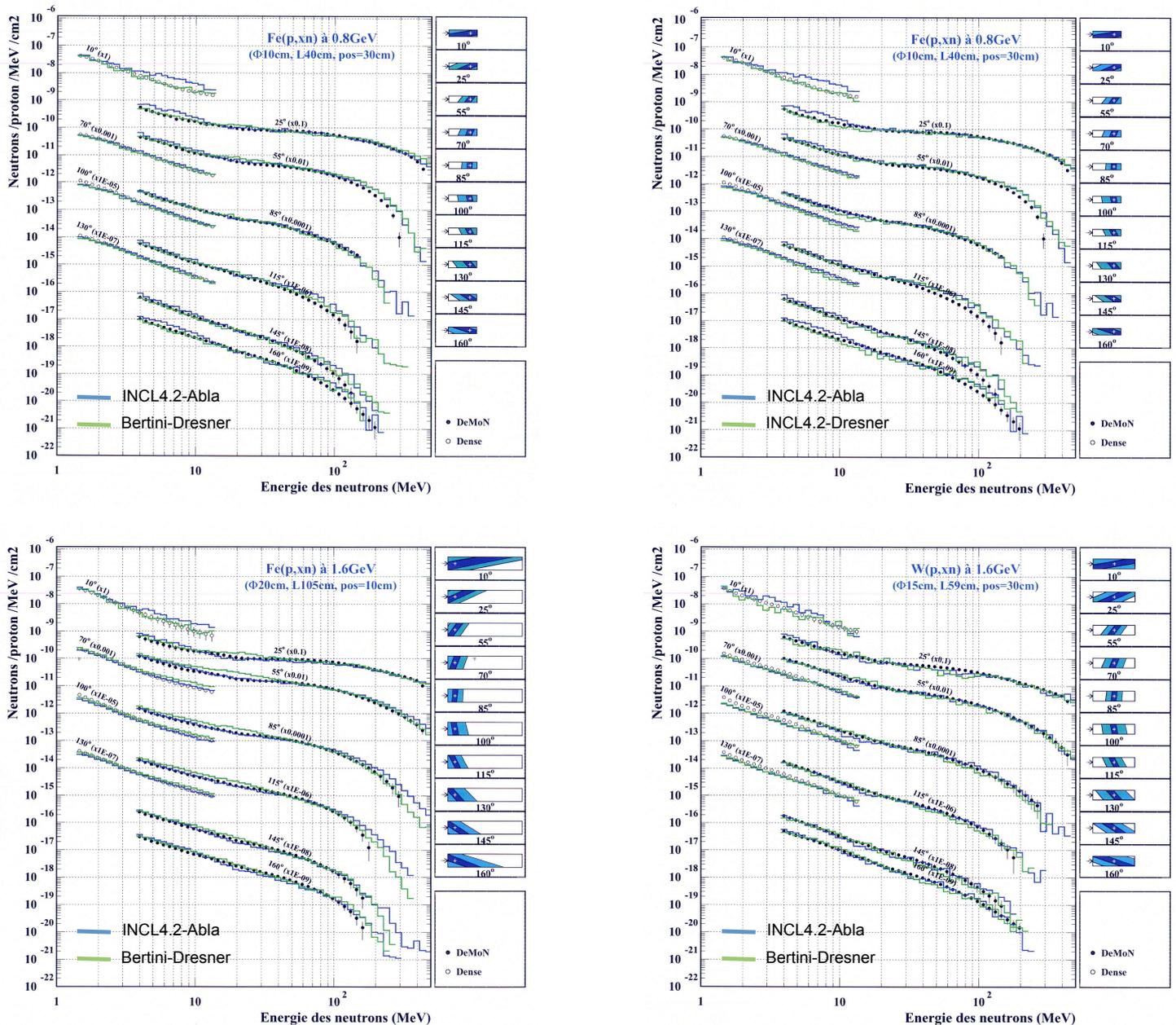


FIGURE A.19 – Spectres de neutrons produits en cibles épaisses à SATURNE. En haut les deux graphes concernent la même expérience  $p(800 \text{ MeV})+\text{Fe}$ , alors que les graphes du bas les expériences  $p(1,6 \text{ GeV})+\text{Fe}$  (gauche) et  $p(1,6 \text{ GeV})+\text{W}$  (droite). Les caractéristiques des expériences sont indiquées sur les graphes ( $\Phi$  : diamètre ;  $L$  : longueur ;  $pos$  : position ; zones vues par les détecteurs données pour chaque angle à droite des graphes (bleu foncé (zone vue totalement) - bleu clair (zone vue partiellement))). Les modèles présentés sont indiqués sur les différents graphes.



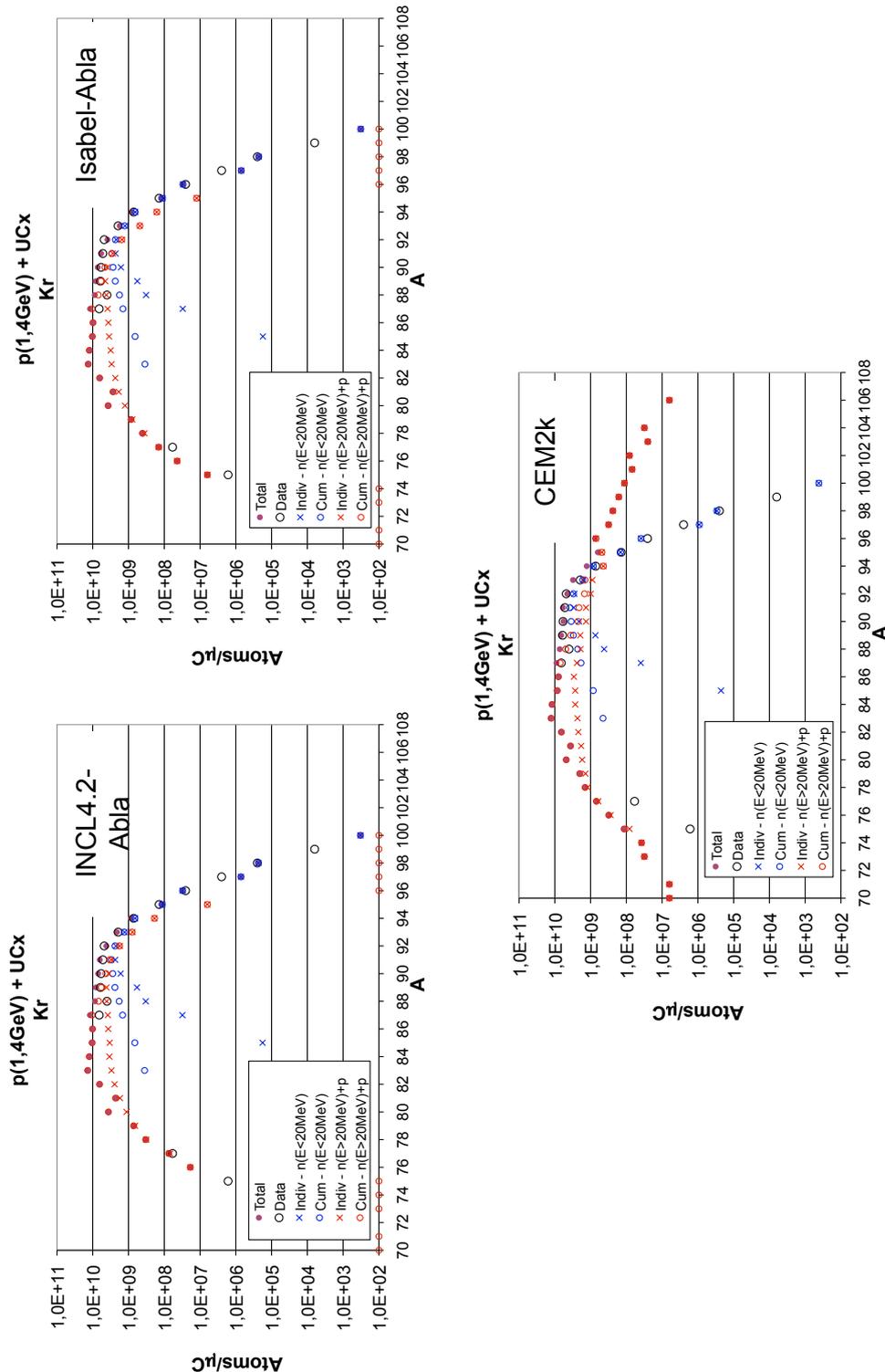


FIGURE A.21 – Distributions en masse du Kr obtenues avec une cible épaisse de UCx bombardée par des protons de 1,4 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies ( $E \leq 20$  MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum)). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.

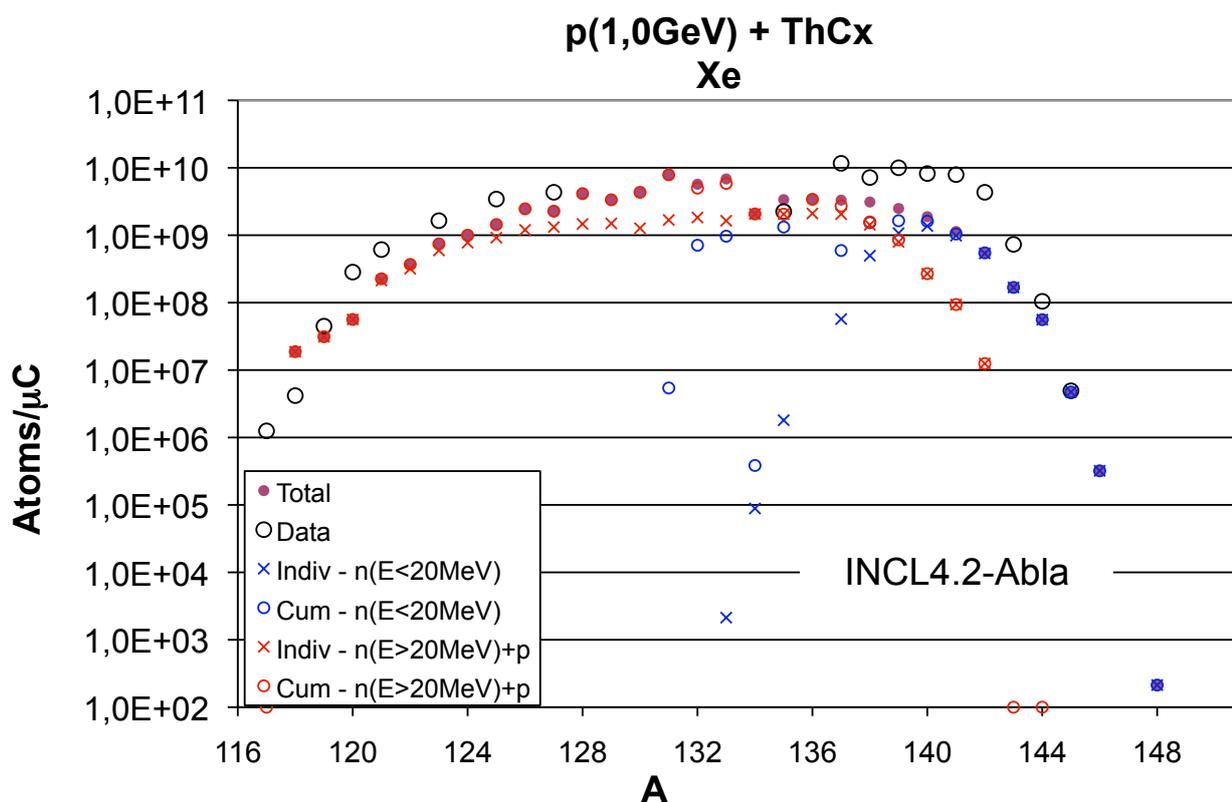


FIGURE A.22 – Distributions en masse du Xe obtenues avec une cible épaisse de ThCx bombardée par des protons de 1,0 GeV (Bergmann et al. 2003). Sont données les différentes contributions (neutrons basses énergies ( $E \leq 20$  MeV) d'un côté et les neutrons hautes énergies et autres particules de l'autre, ainsi que la production directe (Indiv) et celle prenant en compte les ascendants (Cum)). Les trois modèles ou combinaisons de modèles de spallation utilisés sont INCL4.2-Abla, Isabel-Abla et CEM2k implantés dans MCNPX2.5.0.

## A.2 PROGRAMME DU *Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*



### *Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions* *Saclay, February 8-11, 2010*

#### Monday 8 February 2010

10:00-10:15	Welcome	G. Mank (IAEA)
10:15-10:45	Workshop objectives	S. Leray (CEA - France)
10:45-11:15	Result production and Web site tools	M. U. Khandaker (IAEA)
11:15-12:05	Result global analysis: Residues	R. Michel (ZSR - Germany)
12:05-14:00	Lunch	
14:00-14:50	Result global analysis: Neutrons	J.C. David (CEA- France)
14:50-15:40	Result global analysis: Light charged particles	F. Gallmeier (ORNL - USA)
15:40-16:10	Break	
16:10-17:30	Discussion on the global analysis	Convener: A. Boudard (CEA- France)

#### Tuesday 9 February 2010

9:00-9:50	CEM0302 results	S. Mashnik (LANL - USA)
9:50-10:40	CEM0303 results	K. Gudima (Academy of Science - Moldova)
10:40-11:10	Break	
11:10-12:00	CASCADE4 results	H. Kumawat (BARC - India)
12:00-12:50	CASCADEX results	Yu. Korovin (INPE - Russia)
12:50-14:15	Lunch	
14:15-15:30	Discussion: models based on the Dubna cascade	Convener : Y. Yariv (SOREQ - Israel)
15:30-16:00	Break	
16:00-17:00	Isabel results	Y. Yariv (SOREQ - Israel)
17:00-17:50	INCL4 results	J. Cugnon (Univ. Liège - Belgium)



**Second Advanced Workshop on Model Codes for  
Spallation Reactions  
Saclay, February 8-11, 2010**

**Wednesday 10 February 2010**

9:00-9:50	Results with ABLA de-excitation code	M.V. Ricciardi (GSI - Germany)
9:50-10:40	Results with GEMINI++ de-excitation code	R. Charity (Univ. Saint Louis - USA)
10:40-11:10	Break	
11:10-11:40	Results with SMM de-excitation code	D. Mancusi (Univ. Liège - Belgium)
11:40-12:40	Discussion: De-excitation models	Convener: J. Cugnon (Univ. Liège - Belgium)
12:40-14:30	Lunch	
14:30-15:30	GEANT4 results with Bertini, BIC	J. M. Quesada-Molina (Univ. Sevilla - Spain)
15:30-16:00	MCNPX Bertini-Dresner results	F. Gallmeier (ORNL - USA)
16:00-16:30	Break	
16:30-17:30	PHITS Results with Bertini, JAM, JQMD	H. Iwase (KEK - Japan)
17:30-18:00	Discussion: Differences in Bertini models	Convener: S. Mashnik (LANL - USA)

**Thursday 11 February 2010**

9:00-9:30	Benchmarking the codes against residual nuclide spallation data obtained recently	Y. Titarenko (ITEP - Russia)
9:30-11:00	Discussion: Physics conclusions	Convener: S. Leray (CEA- France)
11:00-11:30	Break	
11:30-12:15	Benchmark conclusions	Convener: G. Mank (IAEA)
12:15-12:30	Closing of the Workshop	G. Mank (IAEA)

## A.3 EXEMPLES DE CONCLUSION DE PARTICIPANTS AU WORKSHOP *Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*

Second Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions,  
CEA-Saclay, France, 8-11 Feb 2010; S. G. Mashnik et al., LA-UR-10-00510



### Summary (1)

- CEM03.02(.03) describes reasonably well most of the tested reactions, therefore it can be employed with confidence as a reliable event generator in MCNP6 as the main “workhorse” for intermediate-energy applications.
- However, we have identified several problems to be solved to improve the predictive power of CEM03.02 (and CEM03.03), like: improvement of approximations used to describe nucleon and pion production in elementary interactions during the INC; considering preequilibrium emission (and maybe also coalescence production) of fragments heavier than  $^4\text{He}$ ; accounting for multifragmentation of highly excited nuclei and for “direct” knock out and pick-up processes of complex particle production, to name a few.
- One of the most important but difficult and time consuming improvements of CEM03.02(.03) would be development of a new and less phenomenological evaporation/fission model.

Eolus Project, Monte Carlo Codes (XCP-3)

28

Los Alamos  
UNIVERSITY OF CALIFORNIA

## Geant 4

### Conclusions (2)



- This benchmark study demonstrated areas where improvement is needed. As a result:
  - recently made **improvements to pre-compound**
    - *soft transition to equilibrium has been tuned*
  - recently made **improvements to de-excitation:**
    - IMF evaporation (GEM model)
  - recently made **improvements to fission**
    - fission parameters have been tuned
    - improvements are still possible (angular momentum dependence of fission barrier?)
- plan to add **coalescence models for cascade stage:**
  - The underestimation in the fast cluster yield (especially deuterons) at small angles clearly points to the direct mechanism of complex particle production

## charged particles emission

- ✦ the data indicates that light particles of p, d, t, He, etc. are produced mostly from the direct interaction part (not de-excitation).
- ✦ on the other hand no **surface coalescence** model in Bertini, (JQMD), and JAM
- ✦ a cascade model including the surface coalescence model by Kyushu-Univ. will be included in PHITS.

---

the 2nd Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions, 8-11 February 2010, CEA Saclay - PHITS models H. Iwase (KEK)

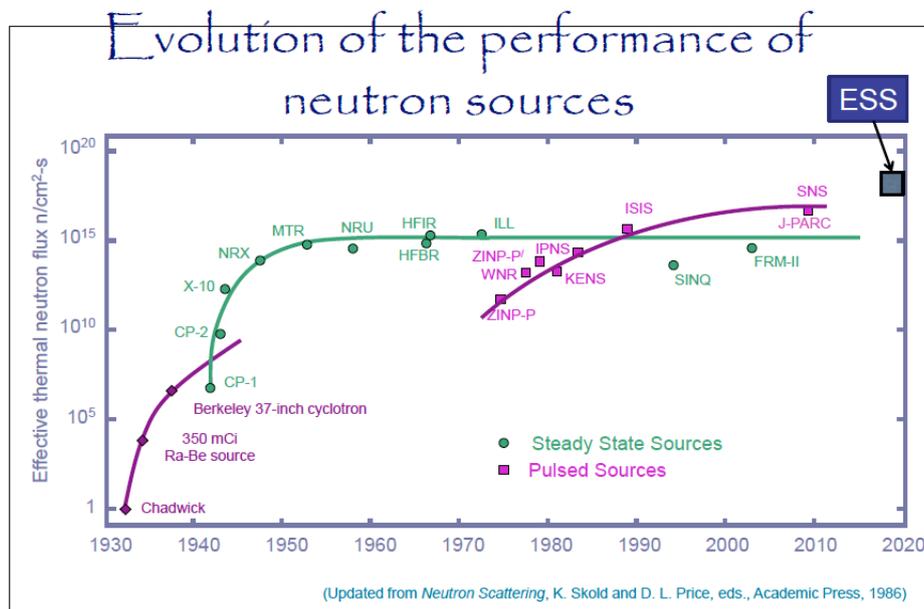
## Summary

- ✦ good: neutron emission
- ✦ reasonably good: isotropic distribution
- ✦ bad: high energy light charged particle emission, pion
- ✦ there is a big room for improvement on JQMD
  
- ✦ benchmarking individual channel is important but benchmarking something integral value, i.e., total dE of fragments in a volume, total activation in Pb irradiated by p, and so on, is also worth to look

---

the 2nd Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions, 8-11 February 2010, CEA Saclay - PHITS models H. Iwase (KEK)

## A.4 ÉVOLUTION DES PERFORMANCES DES SOURCES DE NEUTRONS.





# BIBLIOGRAPHIE

- J. Aichelin, C. Hartnack, A. Bohnet, L. Zhuxia, G. Peilert, H. Stöcker, et W. Greiner. [QMD versus BUU/VUU. Same results from different theories.](#) *Physics Letters B*, 224(1-2) :34 – 39, 1989. ISSN 0370-2693. (Cité pages 12 et 15.)
- J. Aichelin, A. Rosenhauer, G. Peilert, H. Stoecker, et W. Greiner. [Importance of Momentum-Dependent Interactions for the Extraction of the Nuclear Equation of State from High-Energy Heavy-Ion Collisions.](#) *Phys. Rev. Lett.*, 58 :1926–1929, May 1987. (Cité pages 12 et 15.)
- J. Aichelin et H. Stöcker. [Quantum molecular dynamics - A novel approach to N-body correlations in heavy ion collisions.](#) *Physics Letters B*, 176(1-2) :14 – 19, 1986. ISSN 0370-2693. (Cité pages 12 et 15.)
- Jörg Aichelin. ["Quantum" ? molecular dynamics - a dynamical microscopic n-body approach to investigate fragment formation and the nuclear equation of state in heavy ion collisions.](#) *Physics Reports*, 202(5 & 6) :233 – 360, 1991. ISSN 0370-1573. (Cité pages 12 et 15.)
- AIEA. [Benchmark of Spallation Models.](#) 2010. (Cité page 78.)
- K. Ammon, I. Leya, B. Lavielle, E. Gilabert, J.-C. David, U. Herpers, et R. Michel. [Cross sections for the production of helium, neon and argon isotopes by proton-induced reactions on iron and nickel.](#) *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(1) :2 – 12, 2008. ISSN 0168-583X. (Cité pages vii, xv, 55 et 140.)
- Katja Ammon, Jozef Masarik, et Ingo Leya. [New model calculations for the production rates of cosmogenic nuclides in iron meteorites.](#) *Meteoritics & Planetary Science*, 44(4) :485 – 503, 2009. (Cité pages 99, 100 et 102.)
- Th. Aoust et J. Cugnon. [Effects of isospin and energy dependences of the nuclear mean field in spallation reactions.](#) *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 21 :79–85, 2004. ISSN 1434-6001. (Cité page 28.)
- Th. Aoust et J. Cugnon. [Pion physics in the Liège intranuclear cascade model.](#) *Phys. Rev. C*, 74 :064607, Dec 2006. (Cité pages 28 et 29.)
- T. W. Armstrong et K. C. Chandler. A high energy transport code. *Nucl. Sci. Eng.*, 49 :110, 1972. (Cité page 44.)
- F. Atchison. Spallation and fission in heavy metal nuclei under medium energy proton bombardment. *in Proc. Meeting on Targets for Neutron Beam Spallation Source, G. S. Bauer, Ed., Jul-Conf-34, Kernforschungsanlage Julich GmbH, Germany (1980), Julich, June 11-12, pages 17–46, 1979.* (Cité page 46.)

- A.V.Ignatyuk, G.N.Smirenkin, et A.S.Tishin. Phenomenological description of the energy dependence of the level density parameter. (*Yad. Fiz.* 21, 485 (1975)) *Sov. J. Nucl. Phys.*, 21(3) :255, 1975. (Cité page 21.)
- A.V.Ignatyuk, M.G.Itkis, V.N.Okolovich, G.N.Smirenkin, et A.S.Tishin. Fission of pre-actinide nuclei. excitation functions for the ( $\alpha$ , f) reaction. (*Yad. Fiz.* 21, 1185 (1975)) *Sov. J. Nucl. Phys.*, 21(6) :612, 1976. (Cité page 21.)
- Y. Avishai. [Fusion cross section at sub-Coulomb energies](#). *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 286 :285–290, 1978. ISSN 0939-7922. (Cité page 38.)
- B.C. Barashenkov. [Cross Sections of Interactions of Particle and Nuclei with Nuclei](#). *JINR, Dubna*, 1993. (Cité pages vi et 33.)
- J. Barish, T.A. Gabriel, F.S. Alsmiller, et Jr. Alsmiller, R.G. [HETFIS : High-Energy Nucleon-Meson Transport Code with Fission](#). *ORNL-TM-7882*, 1981. (Cité page 46.)
- R. Bass. [Fusion of heavy nuclei in a classical model](#). *Nuclear Physics A*, 231(1) : 45 – 63, 1974. ISSN 0375-9474. (Cité page 22.)
- R. Bass. [FUSION REACTIONS : SUCCESSES AND LIMITATIONS OF A ONE-DIMENSIONAL DESCRIPTION](#). *Proceedings of the Symposium Held at the Hahn-Meitner-Institut für Kernforschung, Berlin October 23-25*, pages 281–293, 1979. (Cité page 37.)
- G.S. Bauer. [The European Spallation Source Study ; ESS](#). *Physica B : Condensed Matter*, 234-236(0) :1214 – 1219, 1997. ISSN 0921-4526. (Cité page 5.)
- G.S Bauer, M Salvatores, et G Heusener. [MEGAPIE, a 1 MW pilot experiment for a liquid metal spallation target](#). *Journal of Nuclear Materials*, 296(1-3) :17 – 33, 2001. ISSN 0022-3115. 4th Int. Workshop on Spallation Materials Technology. (Cité page 111.)
- Christian Beck. Clusters in nuclei. *LECTURE NOTES IN PHYSICS, Springer*, 818, 2010. (Cité page 10.)
- J. Benlliure, A. Grewe, M. de Jong, K.-H. Schmidt, et S. Zhdanov. [Calculated nuclide production yields in relativistic collisions of fissile nuclei](#). *Nuclear Physics A*, 628(3) :458 – 478, 1998. ISSN 0375-9474. (Cité pages vi, 34, 41, 42 et 46.)
- U.C. Bergmann, G. Auböck, R. Catherall, J. Cederkäll, C.Aa. Diget, L. Fraile, S. Franchoo, H. Fynbo, H. Gausemel, U. Georg, T. Giles, E. Hageb, H. Jeppesen, O.C. Jonsson, U. Köster, J. Lettry, T. Nilsson, K. Peräjärvi, H. Ravn, K. Riisager, L. Weissman, J. Äystö, et the ISOLDE collaboration. [Production yields of noble-gas isotopes from ISOLDE UCx/graphite targets](#). *Preprint CERN-EP/2002-048*, 2002. (Cité page 9.)
- U.C. Bergmann, G. Auböck, R. Catherall, J. Cederkäll, C.Aa. Diget, L. Fraile, S. Franchoo, H. Fynbo, H. Gausemel, U. Georg, T. Giles, H. Jeppesen, O.C. Jonsson, U. Köster, J. Lettry, T. Nilsson, K. Peräjärvi, H. Ravn, K. Riisager, L. Weissman, et J. Äystö. [Production yields of noble-gas isotopes from ISOLDE UCx/graphite targets](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 204(0) :220 – 224, 2003. ISSN 0168-583X. (Cité pages ix, x, xvii, 82, 83, 84, 159 et 160.)

- Hugo W. Bertini. [Low-Energy Intranuclear Cascade Calculation](#). *Phys. Rev.*, 131 : 1801–1821, Aug 1963. (Cité page 46.)
- Hugo W. Bertini. [Intranuclear-Cascade Calculation of the Secondary Nucleon Spectra from Nucleon-Nucleus Interactions in the Energy Range 340 to 2900 MeV and Comparisons with Experiment](#). *Phys. Rev.*, 188 :1711–1730, Dec 1969. (Cité page 46.)
- H. A. Bethe et R. F. Bacher. [Nuclear Physics A. Stationary States of Nuclei](#). *Rev. Mod. Phys.*, 8 :82–229, Apr 1936. (Cité page 15.)
- R. Bevilacqua. Neutron-Induced Light-Ion Production from Iron and Bismuth at 175 MeV. *PhD, Uppsala University*, 2011. (Cité pages 11 et 126.)
- M. Blann, H. Gruppelaar, P. Nagel, et J. Rodens. [International Code Comparison for Intermediate Energy Nuclear Data](#). *NEA/OECD, NSC/DOC(94)-2, Paris*, 1993. (Cité pages 4, 53, 54 et 78.)
- M. Bockhorst, G. Burbach, R. Burgwinkel, J. Empt, B. Guse, B. Guse, K. M. Haas, J. Hannappel, K. Heinloth, T. Hey, P. Hoffmann-Rothe, K. Honscheid, T. Jahnen, H. P. Jakob, N. Jöpen, H. Jüngst, U. Kirch, F. J. Klein, D. Kostrewa, L. Lindemann, J. Link, J. Manns, D. Menze, H. Merkel, R. Merkel, W. Neuberger, E. Paul, R. Plötzke, U. Schenk, S. Schmidt, J. Scholmann, P. Schütz, H. C. Schultz-Coulon, M. Schweitzer, W. J. Schwille, M. Q. Tran, G. Umlauf, W. Vogl, R. Wedemeyer, F. Wehnes, J. Wiß kirchen, et A. Wolf. [Measurement of  \$\gamma p \rightarrow K^+ \Lambda\$  and  \$\gamma p \rightarrow K^+ \Sigma^0\$  at photon energies up to 1.47 GeV](#). *Zeitschrift für Physik C Particles and Fields*, 63 :37–47, 1994. ISSN 0170-9739. (Cité page 133.)
- J.P. Bocquet, M. Epherre-Rey Campagnolle, G. Ericsson, T. Johansson, J. Konijn, T. Krogulski, M. Maurel, E. Monnard, J. Mougey, H. Nifenecker, P. Perrin, S. Polikanov, C. Ristori, et G. Tibell. [Observation of the delayed fission induced by antiproton annihilation in  \$^{238}\text{U}\$](#) . *Physics Letters B*, 182(2) :146 – 150, 1986. ISSN 0370-2693. (Cité page 130.)
- J.P. Bondorf, A.S. Botvina, A.S. Iljinov, I.N. Mishustin, et K. Sneppen. [Statistical multifragmentation of nuclei](#). *Physics Reports*, 257(3) :133 – 221, 1995. ISSN 0370-1573. (Cité page 25.)
- J.J. Borger, S.R. Hashemi-Nezhad, D. Alexiev, R. Brandt, W. Westmeier, B. Thomaske, S. Tiutiunikov, M. Kadykov, V.S. Pronskikh, et J. Adam. [Studies of the neutron field of the Energy plus Transmutation set-up under 4 GeV deuteron irradiation](#). *Radiation Measurements*, 46(12) :1765 – 1769, 2011. ISSN 1350-4487. (Cité page 49.)
- A. S. Botvina, A. D. Jackson, et I. N. Mishustin. [Partitioning composite finite systems](#). *Phys. Rev. E*, 62 :R64–R67, Jul 2000. (Cité page 25.)
- A.S. Botvina. [Role of multifragmentation in spallation reactions](#). *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*, pages 131–138, 2008. (Cité pages 25 et 26.)
- A. Boudard et J. Cugnon. [INCL4 - The Liège INC Model for High-Energy Hadron-Nucleus Reactions](#). *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*, pages 29–50, 2008. (Cité pages 29 et 30.)

- A. Boudard, J. Cugnon, S. Leray, et C. Volant. [Intranuclear cascade model for a comprehensive description of spallation reaction data](#). *Phys. Rev. C*, 66 :044615, Oct 2002. (Cité pages vi, xiii, 3, 12, 27, 31, 46, 54 et 110.)
- C.D. Bowman, E.D. Arthur, P.W. Lisowski, G.P. Lawrence, R.J. Jensen, J.L. Anderson, B. Blind, M. Cappiello, J.W. Davidson, T.R. England, L.N. Engel, R.C. Haight, H.G. Hughes III, J.R. Ireland, R.A. Krakowski, R.J. LaBauve, B.C. Lellier, R.T. Perry, G.J. Russell, K.P. Staudhammer, G. Versamis, et W.B. Wilson. [Nuclear energy generation and waste transmutation using an accelerator-driven intense thermal neutron source](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 320(1-2) :336 – 367, 1992. ISSN 0168-9002. (Cité page 4.)
- J. F. Briesmeister. [MCNP - A general Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport](#). *LA-7396-M Revision 2*, 1986. (Cité page 44.)
- W. M. Brobeck, E. O. Lawrence, K. R. MacKenzie, E. M. McMillan, R. Serber, D. C. Sewell, K. M. Simpson, et R. L. Thornton. [Initial Performance of the 184-Inch Cyclotron of the University of California](#). *Phys. Rev.*, 71 :449–450, Apr 1947. (Cité page 4.)
- A. Bubak, A. Budzanowski, D. Filges, F. Goldenbaum, A. Heczko, H. Hodde, L. Jarczyk, B. Kamys, M. Kistryn, St. Kistryn, St. Kliczewski, A. Kowalczyk, E. Kozik, P. Kulesa, H. Machner, A. Magiera, W. Migdał, N. Paul, B. Piskornik, Ignatowicz, M. Puchała, K. Pysz, Z. Rudy, R. Siudak, M. Wojciechowski, et P. Wüstner. [Non-equilibrium emission of complex fragments from  \$p + Au\$  collisions at 2.5 GeV proton beam energy](#). *Phys. Rev. C*, 76 :014618, Jul 2007. (Cité page 10.)
- U. Businaro et S. Gallone. [Asymmetric equilibrium shapes in the liquid drop model](#). *Il Nuovo Cimento (1955-1965)*, 5 :315–317, 1957. ISSN 1827-6121. (Cité page 38.)
- O. Buss, T. Gaitanos, K. Gallmeister, H. van Hees, M. Kaskulov, O. Lalakulich, A.B. Larionov, T. Leitner, J. Weil, et U. Mosel. [Transport-theoretical description of nuclear reactions](#). *Physics Reports*, 512(1-2) :1 – 124, 2012. ISSN 0370-1573. (Cité page 15.)
- B V Carlson, R Donangelo, S R Souza, W G Lynch, A W Steiner, , et M B Tsang. [Fermi breakup and the Statistical Multifragmentation Model](#). *J. Phys. : Conf. Ser.*, 312 :082017, 2011. (Cité page 27.)
- R.F. Carlson. [Proton-Nucleus Total Reaction Cross Sections and Total Cross Sections Up to 1 GeV](#). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 63(1) :93 – 116, 1996. ISSN 0092-640X. (Cité pages vi et 33.)
- S. Chabod, J.-Ch. David, D. Ene, D. Ridikas, et N. Thiollière. [In-target radioactive nuclei production rates with EURISOL single-stage target configuration](#). *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 45 :131–145, 2010. ISSN 1434-6001. (Cité pages xii, 107 et 108.)
- S. Chabod, N. Thiollière, J.-C. David, V. Blideanu, D. Doré, D. Ene, B. Rapp, et D. Ridikas. [Optimization of in-target yields for RIB production : Part I : direct targets](#). *Rapport Interne*, Irfu-08-21, 2008. (Cité pages xii, xiii, 108, 109 et 110.)

- M. B. Chadwick, P. G. Young, S. Chiba, S. C. Frankle, G. M. Hale, H. G. Hughes, A. J. Koning, R. C. Little, R. E. MacFarlane, R. E. Prael, et L. S. Waters. [Cross-Section Evaluations to 150 MeV for Accelerator-Driven Systems and Implementation in MCNPX](#). *Nuclear Science and Engineering*, 131(3) :293 – 328, 1999. (Cité page 92.)
- K. C. Chandler et T. W. Armstrong. [OPERATING INSTRUCTIONS FOR THE HIGH-ENERGY NUCLEON-MESON TRANSPORT CODE HETC](#). *ORNL-4744*, 1972. (Cité page 44.)
- R. Charity. [GEMINI : A CODE TO SIMULATE THE DECAY OF A COMPOUND NUCLEUS BY A SERIES OF BINARY DECAYS](#). *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*, pages 139–148, 2008. (Cité pages 24 et 38.)
- John Cornell. The eurisol report - feasibility study for the european isotope-separation-on-line radioactive beam facility. (*Ganil, Caen*), appendix C, 2003. (Cité page 106.)
- John Cornell, Yorick Blumenfeld, et Graziano Fortuna. Final report of the eurisol design study (2005-2009). *Published by GANIL*, 2009. (Cité pages xii, 6, 81, 103 et 104.)
- J. Cugnon. [Proton-nucleus interaction at high energy](#). *Nuclear Physics A*, 462(4) : 751 – 780, 1987. ISSN 0375-9474. (Cité page 27.)
- J Cugnon, A Boudard, J-C David, A Kelic-Heil, S Leray, D Mancusi, et M V Ricciardi. [Production of heavy clusters \(up to A=10\) by coalescence during the intranuclear cascade phase of spallation reactions](#). *Journal of Physics : Conference Series*, 312(8) :082019, 2011. (Cité page 125.)
- J. Cugnon, P. Deneye, et J. Vandermeulen. [Strangeness production in antiproton annihilation on nuclei](#). *Phys. Rev. C*, 41 :1701–1718, Apr 1990. (Cité pages xiv, 129, 131 et 133.)
- J. Cugnon et P. Henrotte. [The low-energy limit of validity of the intranuclear cascade model](#). *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 16 : 393–407, 2003. ISSN 1434-6001. (Cité page 32.)
- J. Cugnon, D. Kinet, et J. Vandermeulen. [Pion production in central high energy nuclear collisions](#). *Nuclear Physics A*, 379(3) :553 – 567, 1982. ISSN 0375-9474. (Cité page 27.)
- J. Cugnon, A. Lejeune, et H.-J. Schulze. [Hypernuclei in the Skyrme-Hartree-Fock formalism with a microscopic hyperon-nucleon force](#). *Phys. Rev. C*, 62 :064308, Nov 2000. (Cité page 133.)
- J. Cugnon et M.-C. Lemaire. [Medium effects in pion production](#). *Nuclear Physics A*, 489(4) :781 – 802, 1988. ISSN 0375-9474. (Cité page 29.)
- J. Cugnon, S. Leray, E. Martinez, Y. Patin, et S. Vuillier. [New constraints on the  \$\Delta\$  production cross section](#). *Phys. Rev. C*, 56 :2431–2439, Nov 1997. (Cité page 29.)

- J. Cugnon, D. L'Hôte, et J. Vandermeulen. [Simple parametrization of cross-sections for nuclear transport studies up to the GeV range](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 111(3-4) :215 – 220, 1996. ISSN 0168-583X. (Cité page 29.)
- J. Cugnon, T. Mizutani, et J. Vandermeulen. [Equilibration in relativistic nuclear collisions. A Monte Carlo calculation](#). *Nuclear Physics A*, 352(3) :505 – 534, 1981. ISSN 0375-9474. (Cité page 27.)
- J.-C. David, V. Blideanu, A. Boudard, D. Doré, S. Leray, B. Rapp, D. Ridikas, et N. Thiollière. [Benchmark calculations on residue production within the EURISOL DS project ; Part I : thin targets](#). *Rapport Interne*, DAPNIA-07-04, 2007a. (Cité pages vii, xiii, xv, 56, 57, 82, 107, 110 et 142.)
- J.-C. David, V. Blideanu, A. Boudard, D. Doré, S. Leray, B. Rapp, D. Ridikas, et N. Thiollière. [Benchmark calculations on residue production within the EURISOL DS project ; Part II : thick targets](#). *Rapport Interne*, DAPNIA-07-59, 2007b. (Cité pages xiii, 57, 82, 88, 107 et 110.)
- J.-C. David, A. Boudard, J. Cugnon, S. Ghali, S. Leray, D. Mancusi, et L. Zanini. Modeling astatine production in liquid lead-bismuth spallation targets. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, submitted, 2013. (Cité page 116.)
- J.-C. David, A. Boudard, J. Cugnon, A. Kelic-Heil, S. Leray, D. Mancusi, et M.V. Ricciardi. [Spallation modeling what's new on nuclei production with INCL4.5-Abla07 ?](#). *Memorie della Società Astronomica Italiana*, 82(4) :909 – 912, 2011a. (Cité pages 99 et 126.)
- J.-C. David, A. Boudard, J. Cugnon, S. Leray, et D. Mancusi. [Report on the predicting capabilities of the standard simulation tools in the 150-600 MeV energy range \(FP7-ANDES - WP 4 - Task T4.1 - Deliverable D4.1\)](#). *Rapport Interne*, Irfu-11-249, 2011b. (Cité page 55.)
- J.-C. David, C.Varignon, F.Borne, A.Boudard, F.Brochard, S.Crespin, J.C.Duchazeaubeneix, D.Durand, J.M.Durand, J.Fréhaut, F.Hannappe, C.Lebun, J.F.Lecolley, X.Ledoux, F.Lefèbvres, R.Legrain, S.Leray, M.Louvel, E.Martinez, S.Ménard, G.Milleret, Y.Patin, E.Petitbon, F.Plouin, J.P.Schapira, L.Stuggé, Y.Terrien, J.Thun, C. Volant, et D.M.Whittal. [Spallation Neutron Production on Thick Target at Saturne](#). *Proceedings of the International Workshop on Nuclear Data for the Transmutation of Nuclear Waste - GSI-Darmstadt, Germany - September 1-5, 2003*. ISSN 3-00-012276-1. (Cité pages vii, 9, 47, 54 et 79.)
- J.-C. David, S. Lemaire, et S. Leray. [NUDATRA - WP 5.4 - Task T5.4.3 Activation calculations for the MEGAPIE target with INCL4 and ABLA, and comparison with other codes](#). *Rapport Interne*, Irfu-08-453, 2008. (Cité pages xiii, 49, 112 et 113.)
- S. de Pina, E.C. de Oliveira, E.L. Medeiros, S.B. Duarte, et M. Goncalves. [Photo-nuclear  \$K^+\$  production calculation near threshold](#). *Physics Letters B*, 434(1-2) : 1 – 6, 1998. ISSN 0370-2693. (Cité page 131.)

- L. Donadille, A. Boudard, J.C. David, S. Leray, et C. Volant. [Activity and Chemical Composition Modifications Induced by Spallation Residues in a Pb or Pb-Bi Target](#). *Nuclear Applications of Accelerators Technology- AccApp'03 (Int. Meeting) San Diego, California, June 1-5, 2003*. (Cité pages vii et 47.)
- Carl B. Dover et P. J. Moffa. [Interaction of  \$K^+\$  mesons with nuclei](#). *Phys. Rev. C*, 16 :1087–1096, Sep 1977. (Cité pages xiv, 129 et 130.)
- Lawrence Dresner. [EVAP : a FORTRAN program for calculating the evaporation of various particles from excited compound nuclei](#). *ORNL-TM-196*, 1962. (Cité page 46.)
- M. Ducauze. Étude des noyaux résiduels de spallation produits dans des cibles minces de plomb et de tungstène et dans une cible épaisse de plomb. *Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay*, 2001. (Cité page 9.)
- J.-É. Ducret. La spallation en cinématique inverse : pourquoi faire une mesure en coïncidence ? *Habilitation à diriger des recherches, Université de Caen*, 2006. (Cité page 4.)
- D. Ene. Evaluation of ess safety relevant concerns assuming two basic concepts for the target station. *ESS report*, (EDMS Archive number 1171808), 2011. (Cité pages xiii et 117.)
- T.R. England et B.F. Rider. [Evaluation and Compilation of Fission Yields](#) . *LA-UR-94-3106*, 1994. (Cité page 83.)
- T. Enqvist, J. Benlliure, F. Farget, K.-H. Schmidt, P. Armbruster, M. Bernas, L. Tassan-Got, A. Boudard, R. Legrain, C. Volant, C. Böckstiegel, M. de Jong, et J.P. Dufour. [Systematic experimental survey on projectile fragmentation and fission induced in collisions of  \$^{238}\text{U}\$  at 1 A GeV with lead](#). *Nuclear Physics A*, 658(1) :47 – 66, 1999. ISSN 0375-9474. (Cité page 43.)
- Marcelle Épherre et Élie Gradsztajn. [Calcul de la spallation de  \$^{12}\text{C}\$  et  \$^{16}\text{O}\$  par des protons de 70 à 200 MeV](#). *LE JOURNAL DE PHYSIQUE*, 28(10) :745–751, 1967. (Cité page 26.)
- D.A. Evans et D.T. Goodhead. [Spallation hypernuclei produced by 6 GeV/  \$c\$   \$K^-\$  Mesons](#). *Nuclear Physics B*, 3(5) :441 – 463, 1967. ISSN 0550-3213. (Cité page 129.)
- A. Fassò, A. Ferrari, S. Roesler, P.R. Sala, F. Ballarini, A. Ottolenghi, G. Battistoni, F. Cerutti, E. Gadioli, M.V. Garzelli, A. Empl, et J. Ranft. [The physics models of FLUKA : status and recent developments](#) . *Computing in High Energy and Nuclear Physics, 24-28 March 2003, La Jolla, California*, ePrint hep-ph/0306267, 2003. (Cité page 86.)
- Enrico Fermi. [High Energy Nuclear Events](#). *Progress of Theoretical Physics*, 5 (4) :570–583, 1950. (Cité page 26.)
- B. Fernandez-Dominguez. Étude de la production des fragments de fission issus de la réaction  $^{208}\text{Pb}+p$  à 500 MeV. *Thèse de doctorat, Université de Caen*, 2003. (Cité page 4.)

- Alfredo Ferrari, Paola R. Sala, Alberto Fasso, et Johannes Ranft. [FLUKA : A multi-particle transport code \(Program version 2005\)](#). *CERN-2005-010, SLAC-R-773, INFN-TC-05-11*, 2005. (Cit  pages xiii, 86 et 113.)
- D. Filges et F. Goldenbaum. *Handbook of Spallation Research : Theory, Experiments and Applications*. John Wiley & Sons, 2010. (Cit  pages v, 3, 7, 8 et 9.)
- D. Filges, S. Leray, Y. Yariv, A. Mengoni, A. Stanculescu, et G. Mank. [Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions](#). *IAEA-INDC(NDS)-1530*, pages 29–50, 2008. (Cit  page 58.)
- D. Filges, P. Nagel, et R.D. Neef. [Thick Target Benchmark for Lead and Tungsten](#). *NEA/OECD, NSC/DOC(95) 2, Paris*, 1995. (Cit  pages 53 et 78.)
- C. Y. Fu et T. A. Gabriel. [CALOR As A Single Code Including A Modular Version of HETC](#). *ORNL/CP-100054*, 1998. (Cit  pages vi, 44 et 45.)
- S. Furihata. [Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 171(3) :251 – 258, 2000. ISSN 0168-583X. (Cit  page 83.)
- S. Furihata et T. Nakamura. [Calculation of Nuclide Productions from Proton Induced Reactions on Heavy Targets with INC/GEM](#). *J. Nucl. Sci. Technol., Suppl. 2* :758–761, 2002. (Cit  page 83.)
- S. Furihata, K. Niita, S. Meigo, Y. Ikeda, et F. Maekawa. [The GEM code : A simulation program for the evaporation and the fission process of an excited nucleus](#). *JAERI-Data/Code 2001-015*, 2001. (Cit  page 83.)
- T. A. Gabriel. [The high energy transport code HETC](#). *ORNL/TM-9727*, 1985. (Cit  page 44.)
- J.-J. Gaimard et K.-H. Schmidt. [A reexamination of the abrasion-ablation model for the description of the nuclear fragmentation reaction](#). *Nuclear Physics A*, 531(3-4) :709 – 745, 1991. ISSN 0375-9474. (Cit  page 34.)
- S. Ghali.  tude de la production d’isotopes d’astate dans une cible de plomb-bismuth liquide. *Stage Master 2, Universit  Pierre et Marie Curie, Paris 6*, 2010. (Cit  pages 11 et 115.)
- A. Gilbert et A.G.W. Cameron. A composite nuclear-level density formula with shell corrections. *Can. J. Phys.*, 43 :1446–1496, 1965. (Cit  pages 21 et 36.)
- K.-H. Glander, J. Barth, W. Braun, J. Hannappel, N. J pen, F. Klein, E. Klempt, R. Lawall, J. Link, D. Menze, W. Neuerburg, M. Ostrick, E. Paul, I. Schulday, W. Schwille, H. Pee, F. Wieland, J. Wi  kirchen, et C. Wu. [Measurement of  \$\gamma p \rightarrow K^+ \Lambda\$  and  \$\gamma p \rightarrow K^+ \Sigma^0\$  at photon energies up to 2.6 GeV](#). *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 19 :251–273, 2004. ISSN 1434-6001. (Cit  page 133.)
- M. L. Goldberger. [The Interaction of High Energy Neutrons and Heavy Nuclei](#). *Phys. Rev.*, 74 :1269–1277, Nov 1948. (Cit  page 15.)

- M. Goncalves, S. de Pina, D.A. Lima, W. Milomen, E.L. Medeiros, et S.B. Duarte. [Many-body cascade calculation for photonuclear reactions](#). *Physics Letters B*, 406(1-2) :1 – 6, 1997. ISSN 0370-2693. (Cité page 131.)
- T. Gorbinet. Étude des réactions de spallation  $^{136}\text{Xe}+p$  et  $^{136}\text{Xe}+^{12}\text{C}$  à 1 GeV par nucléon auprès de l'accélérateur GSI (Darmstadt, Allemagne). *Thèse de doctorat, Université Paris sud XI*, 2011. (Cité pages 4 et 10.)
- C. Guet, E. Strumberger, et M. Brack. [Liquid drop parameters for hot nuclei](#). *Physics Letters B*, 205(4) :427 – 431, 1988. ISSN 0370-2693. (Cité page 21.)
- F. Gulminelli. L'utilisation des réactions nucléaires (directes et) complexes pour l'étude des aspects (quantiques et) statistiques du noyau atomique. *Cours de Master 2 (2004-2005) - LPC Caen*, 2004. (Cité pages 12 et 15.)
- M Harvey, P Taddei, D Mirkovic, et W Newhauser. [MO-EE-A2-01 : Nuclear Model Evaluation of Uncertainties in Therapeutic Absorbed Dose and Secondary Neutron Production in Proton Radiotherapy Using MCNPX](#). volume 36, pages 2702–2702. AAPM, 2009. (Cité page 49.)
- Shintaro Hashimoto, Yosuke Iwamoto, Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Alain Boudard, Joseph Cugnon, Jean-Christophe David, Sylvie Leray, et Davide Mancusi. [NEW APPROACH FOR DESCRIBING NUCLEAR REACTION BASED ON INTRA NUCLEAR CASCADE COUPLED WITH DWBA](#). *Abstracts - conference ICRS-12 & RPSD-2012*, 4A-23, 2012. (Cité page 51.)
- Walter Hauser et Herman Feshbach. [The Inelastic Scattering of Neutrons](#). *Phys. Rev.*, 87 :366–373, Jul 1952. (Cité page 22.)
- John S. Hendricks, Gregg W. McKinney, Laurie S. Waters, Teresa L. Roberts, Harry W. Egdorf, Joshua P. Finch, Holly R. Trelue, Eric J. Pitcher, Douglas R. Mayo, Martyn T. Swinhoe, Stephen J. Tobin, Joe W. Durkee, Franz X. Gallmeier, Jean-Christophe David, William B. Hamilton, et Julian Lebenhaft. [MCNPX EXTENSIONS VERSION 2.5.0](#). *LA-UR-05-2675*, 2005. (Cité pages 3, 27, 34 et 49.)
- P. Henrotte. [Extension du modèle de cascade intranucléaire pour les réactions de spallation](#). *Thèse, Université de Liège*, 2005. (Cité page 31.)
- C.-M. Herbach, D. Hilscher, U. Jahnke, V.G. Tishchenko, J. Galin, A. Letourneau, A. Peghaire, D. Filges, F. Goldenbaum, L. Pienkowski, W.U. Schroder, et J. Toke. [Charged-particle evaporation and pre-equilibrium emission in 1.2 GeV proton-induced spallation reactions](#). *Nuclear Physics A*, 765(3-4) :426 – 463, 2006. ISSN 0375-9474. (Cité pages vii, xv, 55, 139 et 140.)
- J.R. Huizenga et G. Igo. [Theoretical reaction cross sections for alpha particles with an optical model](#). *Nuclear Physics*, 29(0) :462 – 473, 1962. ISSN 0029-5582. (Cité page 22.)
- ICRU63. *Nuclear Data for Neutron and Proton Radiotherapy and for Radiation Protection (Report 63)*, 2000. (Cité pages 92 et 93.)
- A.V. Ignatyuk. Nuclear ground-state masses and deformations. *G.C. Bonsignori, M. Bruno, A. Ventura, D. Vretenar (Eds.), Proceedings on of the Conference*

- Bologna 2000 : Structure of the Nucleus at the Dawn of the Century, Bologna, Italy 29 May-3 June 2000, World Scientific, Singapore, page 287, 2001. (Cité page 36.)*
- Y. Iwamoto, M. Hagiwara, D. Satoh, H. Iwase, H. Yashima, T. Itoga, T. Sato, Y. Nakane, H. Nakashima, Y. Sakamoto, T. Matsumoto, A. Masuda, J. Nishiyama, A. Tamii, K. Hatanaka, C. Theis, E. Feldbaumer, L. Jaegerhofer, C. Pioch, V. Mares, et T. Nakamura. Characterisation of quasi-monoenergetic neutron energy spectra using  ${}^7\text{Li}(p,n)$  reactions at 246-389 MeV. *Shielding Aspects of Accelerators, Targets and Irradiation Facilities - SATIF 10 - Workshop Proceedings, Geneva, Switzerland 2-4 June*, page 53, 2010. (Cité page 11.)
- J. Janczyszyn, W. Pohorecki, G. Domanska, et S. Taczanowski. Benchmark on radionuclides production and heat generation rates in lead target exposed to 660 MeV protons. *AGH - University of Science and Technology (Krakow) - EC EUROTRANS-NUDATRA and IAEA CRP Report*, 2011. (Cité pages x, 78, 85, 86 et 88.)
- B. Juliá-Díaz, B. Saghai, T.-S. H. Lee, et F. Tabakin. [Dynamical coupled-channels approach to hadronic and electromagnetic kaon-hyperon production on the proton.](#) *Phys. Rev. C*, 73 :055204, May 2006. (Cité page 133.)
- A.R. Junghans, M. de Jong, H.-G. Clerc, A.V. Ignatyuk, G.A. Kudyaev, et K.-H. Schmidt. [Projectile-fragment yields as a probe for the collective enhancement in the nuclear level density.](#) *Nuclear Physics A*, 629(3-4) :635 – 655, 1998. ISSN 0375-9474. (Cité pages 3, 21, 34, 36 et 46.)
- B. Jurado, C. Schmitt, K.-H. Schmidt, J. Benlliure, et A.R. Junghans. [A critical analysis of the modelling of dissipation in fission.](#) *Nuclear Physics A*, 747(1) : 14 – 43, 2005. ISSN 0375-9474. (Cité page 40.)
- Pekka Kaitaniemi, Alain Boudard, Sylvie Leray, Joseph Cugnon, et Davide Mancusi. [INCL Intra-Nuclear Cascade and ABLA De-Excitation Models in Geant4.](#) *PROGRESS IN NUCLEAR SCIENCE TECHNOLOGY*, 2 :788 – 793, 2011. (Cité pages 50 et 126.)
- J. Kaplan. [Minutes of the Meeting at Stanford University, California July 11-12, 1947.](#) *Phys. Rev.*, 72 :738–748, Oct 1947. (Cité pages 4 et 15.)
- A. Kelic, M.V. Ricciardi, et K.-H. Schmidt. [ABLA07 - TOWARDS A COMPLETE DESCRIPTION OF THE DECAY CHANNELS OF A NUCLEAR SYSTEM FROM SPONTANEOUS FISSION TO MULTIFRAGMENTATION.](#) *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*, pages 181–222, 2008. (Cité pages vi, 34, 37 et 39.)
- Aleksandra Kelic. Task 11 : Beam intensity calculations. *EURISOL Design Study - Final Report - Detailed Version (Published on CD only)*, 2009. (Cité page 109.)
- A. Koning, S. Hilaire, et S. Goriely. *TALYS-1.4*, 2011. (Cité page 92.)
- A.J. Koning et D. Rochman. *TENDL-2010*. 2010. (Cité pages 92 et 101.)
- A. Yu. Konobeyev, C.H.M. Broeders, et U. Fischer. Improved displacement cross sections for structural materials irradiated with intermediate and high energy

- protons. *Nuclear Applications and Utilization of Accelerators - AccApp'07 (Int. Meeting) Pocatello, USA, July 29-August 2*, page 241, 2007. (Cité page 9.)
- Yu. Korovin, I. Kuptsov, A. Natalenko, A. Stankovskiy, A. Tikhonenko, et A. Konobeyev. Development of a new code to simulate radiation damage and gas accumulation in the structural materials of ads. *ARIA 2008 - 1st Workshop on Accelerator Radiation Induced Activation - October 13-17 - Paul Scherrer Institut, Switzerland*, 2008. (Cité page 9.)
- Yu. A. Korovin, A. Yu. Konobeyev, et P. E. Pereslavytsev. [The Code for the Calculation of Nuclide Composition and Activity of Irradiated Materials](#). *J. Yadernye Konstanty (Nucl. Constants)*, 3-4 :117, 1992. (Cité pages xiii et 113.)
- Yu. A. Korovin, A. A. Natalenko, A. Yu. Stankovskiy, S. G. Mashnik, et A. Yu. Konobeyev. [High energy activation data library \(HEAD-2009\)](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 624(1) :20 – 26, 2010. ISSN 0168-9002. (Cité pages xi, 49, 94 et 95.)
- H. A. Kramers. [Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions](#). *Physica*, 7(4) :284 – 304, 1940. ISSN 0031-8914. (Cité page 24.)
- É. Le Gentil. Analyse des résidus de spallation et des particules associées dans la réaction Fe+p à 1 GeV par nucléon. *Thèse de doctorat, Université d'Évry*, 2006. (Cité pages 4 et 11.)
- E. Le Gentil, T. Aumann, C. O. Bacri, J. Benlliure, S. Bianchin, M. Böhmer, A. Boudard, J. Brzychczyk, E. Casarejos, M. Combet, L. Donadille, J. E. Ducret, M. Fernandez-Ordoñez, R. Gernhäuser, H. Johansson, K. Kezzar, T. Kurtukian-Nieto, A. Lafriakh, F. Lavaud, A. Le Fèvre, S. Leray, J. Lühning, J. Lukasik, U. Lynen, W. F. J. Müller, P. Pawlowski, S. Pietri, F. Rejmund, C. Schwarz, C. Sfonti, H. Simon, W. Trautmann, C. Volant, et O. Yordanov. [Coincidence Measurement of Residues and Light Particles in the Reaction  \$^{56}\text{Fe} + p\$  at 1 GeV per Nucleon with the Spallation Reactions Setup SPALADIN](#). *Phys. Rev. Lett.*, 100 :022701, Jan 2008. (Cité page 11.)
- A. Leprince, J.-C. David, et S. Leray. [Excitation functions on thin  \$^{nat}\text{W}\$  target from the new INCL4.6-Abla07](#). *Rapport Interne*, Irfu-12-61, 2012. (Cité pages xiv et 118.)
- S. Leray, F. Borne, S. Crespin, J. Fréhaut, X. Ledoux, E. Martinez, Y. Patin, E. Petibon, P. Pras, A. Boudard, R. Legrain, Y. Terrien, F. Brochard, D. Drake, J. C. Duchazeaubeneix, J. M. Durand, S. I. Meigo, G. Milleret, D. M. Whittal, W. Wlazole, D. Durand, C. Le Brun, F. R. Lecolley, J. F. Lecolley, F. Lefebvres, M. Louvel, C. Varignon, F. Hanappe, S. Ménard, L. Stuttge, et J. Thun. [Spallation neutron production by 0.8, 1.2, and 1.6 GeV protons on various targets](#). *Phys. Rev. C*, 65 :044621, Apr 2002. (Cité page 9.)
- S. Leray, A. Boudard, J. Cugnon, J. C. David, A. Kelic-Heil, D. Mancusi, et M. V. Ricciardi. [Improved modelling of helium and tritium production for spallation targets](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 268(6) :581 – 586, 2010. ISSN 0168-583X. (Cité pages vii, xv, xvii, 55, 115, 139 et 140.)

- I. Leya, J.-C. David, S. Leray, R. Wieler, et R. Michel. [Production of noble gas isotopes by proton-induced reactions on bismuth](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 266(7) :1030 – 1042, 2008. ISSN 0168-583X. (Cité pages xi, 96 et 97.)
- I. Leya, S. Neumann, R. Wieler, et R. Michel. [The production of cosmogenic nuclides by galactic cosmic-ray particles for  \$2\pi\$  exposure geometries](#). *Meteoritics & Planetary Science*, 36(11) :1547–1561, 2001. ISSN 1945-5100. (Cité pages xi et 99.)
- I. Leya, R. Wieler, J.-C. David, S. Leray, L. Donadille, J. Cugnon, et R. Michel. [Production of noble gas isotopes by proton-induced reactions on lead](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 229(1) :1 – 23, 2005. ISSN 0168-583X. (Cité page 96.)
- I. Leya, R. Wieler, J.-C. David, S. Leray, L. Donadille, J. Cugnon, et R. Michel. [Production of noble gas isotopes by proton-induced reactions on lead and bismuth](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 562(2) :760 – 763, 2006. ISSN 0168-9002. (Cité page 96.)
- Ingo Leya et Jozef Masarik. [Cosmogenic nuclides in stony meteorites revisited](#). *Meteoritics & Planetary Science*, 44(7) :1061–1086, 2009. ISSN 1945-5100. (Cité page 101.)
- Ingo Leya et Rolf Michel. [Cross sections for neutron-induced reactions up to 1.6 GeV for target elements relevant for cosmochemical, geochemical, and technological applications](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 269(21) :2487 – 2503, 2011. ISSN 0168-583X. (Cité pages 11, 101 et 126.)
- M. Lindroos, S. Bousson, R. Calaga, H. Danared, G. Devanz, R. Duperrier, J. Eguia, M. Eshraqi, S. Gammino, H. Hahn, A. Jansson, C. Oyon, S. Pape-Møller, S. Peggs, A. Ponton, K. Rathsman, R. Ruber, T. Satogata, et G. Trahern. [The European Spallation Source](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 269(24) : 3258 – 3260, 2011. ISSN 0168-583X. (Cité page 4.)
- A. Lou et D. T. Goodhead. [Production of Heavy Spallation Hypernuclei by 800-MeV/  \$c K^-\$  Mesons](#). *Phys. Rev.*, 168 :1214–1223, Apr 1968. (Cité page 129.)
- H. Machner, D. G. Aschman, K. Baruth-Ram, J. Carter, A. A. Cowley, F. Goldenbaum, B. M. Nangu, J. V. Pilcher, E. Sideras-Haddad, J. P. F. Sellschop, F. D. Smit, B. Spoelstra, et D. Steyn. [Isotopic production cross sections in proton-nucleus collisions at 200 MeV](#). *Phys. Rev. C*, 73 :044606, Apr 2006. (Cité page 10.)
- Davide Mancusi, Alain Boudard, Joseph Cugnon, Jean-Christophe David, Thomas Gorbinet, et Sylvie Leray. [Elusiveness of evidence for multifragmentation in 1-GeV proton-nucleus reactions](#). *Phys. Rev. C*, 84 :064615, Dec 2011a. (Cité page 11.)

- Davide Mancusi, Alain Boudard, Joseph Cugnon, Jean-Christophe David, et Sylvie Leray. [Influence of nuclear de-excitation on observables relevant for space exploration](#). *Advances in Space Research*, 47(7) :1194 – 1199, 2011b. ISSN 0273-1177. (Cité pages 7 et 125.)
- Stepan G. Mashnik. [On Solar System and Cosmic Rays Nucleosynthesis and Spallation Processes](#). *arXiv :astro-ph/0008382v1*, 2000. (Cité page 7.)
- T. McManamy, M. Rennich, F. Gallmeier, P. Ferguson, et J. Janney. [3 MW solid rotating target design](#). *Journal of Nuclear Materials*, 398(1-3) :35 – 42, 2010. ISSN 0022-3115. (Cité page 7.)
- S Meigo, H Takada, S Chiba, T Nakamoto, K Ishibashi, N Matsufuji, K Maehata, N Shigyo, Y Watanabe, et M Numajiri. [Measurements of neutron spectra produced from a thick lead target bombarded with 0.5- and 1.5-GeV protons](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 431(3) :521 – 530, 1999. ISSN 0168-9002. (Cité page 9.)
- S. Ménard. Production de neutrons en cible épaisse par un faisceau de protons de haute énergie. *Thèse de doctorat, Université d'Orsay*, 1998. (Cité pages 9 et 79.)
- N. Metropolis, R. Bivins, M. Storm, J. M. Miller, G. Friedlander, et Anthony Turkevich. [Monte Carlo Calculations on Intranuclear Cascades. II. High-Energy Studies and Pion Processes](#). *Phys. Rev.*, 110 :204–219, Apr 1958a. (Cité page 16.)
- N. Metropolis, R. Bivins, M. Storm, Anthony Turkevich, J. M. Miller, et G. Friedlander. [Monte Carlo Calculations on Intranuclear Cascades. I. Low-Energy Studies](#). *Phys. Rev.*, 110 :185–203, Apr 1958b. (Cité page 16.)
- J.P. Meulders, A.Koning, et S.Leray. [High and Intermediate energy Nuclear Data for Accelerator-driven Systems](#). *HINDAS final report*, 2005. (Cité page 54.)
- R. Michel, W. Glasser, U. Herpers, H. Schuhmacher, H. J. Brede, V. Dangendorf, R. Nolte, P. Malmberg, A. V. Prokofiev, A. N. Smirnov, I. Rishkov, D. Kollár, J. P. Meulders, M. Duijvestijn, et A. Koning. Residual Nuclide Production from Iron, Lead, and Uranium by Neutron-Induced Reactions up to 180 MeV. *International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (2004) - AIP Conference Proceedings - Santa Fe, New Mexico, 26 September - 1 October*, 769 :861, 2005. (Cité page 11.)
- R. Michel et P. Nagel. [International Codes and Model Intercomparison for Intermediate Energy Activation Yields](#). *NEA/OECD, NSC/DOC(97)-1, Paris*, 1997. (Cité pages 4, 53, 54, 67 et 78.)
- Rolf Michel. [The Concept of Intrinsic Discrepancy Applied to the Comparison of Experimental and Theoretical Data for Benchmarking Spallation Models](#). *IAEA - Consultants' Meeting on Spallation Reactions (6-7 October)*, 2009. (Cité page 61.)
- N.V. Mokhov. [The Mars Code System User's Guide](#). *Fermilab-FN-628*, 1995. (Cité page 51.)

- P. Moller, J.R. Nix, W.D. Myers, et W.J. Swiatecki. [Nuclear Ground-State Masses and Deformations](#). *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 59(2) :185 – 381, 1995. ISSN 0092-640X. (Cité page 36.)
- R. Moormann. Ess-target inventories and their radiotoxic and toxic potential. *Document ESS-R-1205-R.Moormann-1-02*, 2003. (Cité page 104.)
- Rainer Moormann, Klaus Bongardt, et Suresh Chiriki. [Safety aspects of high power targets for European spallation sources](#). *International Conference on the Physics of Reactors - Nuclear Power : A Sustainable Resource ; Interlaken, Switzerland, September 14-19, 2008*, 2008. (Cité page 104.)
- L.G. Moretto et G.J. Wozniak. [The Decay of Hot Nuclei](#). *LBL-26207. DE89 J06609*, 1988. (Cité page 24.)
- L.G. Moretto, G.J. Wozniak, et L.G. Sobotka. [The Businaro-Gallone Transition as Observed in Complete Charge Distributions from Compound Nucleus Decay](#). *LBL-18127*, 1984. (Cité page 38.)
- Luciano G. Moretto. [Statistical emission of large fragments : A general theoretical approach](#). *Nuclear Physics A*, 247(2) :211 – 230, 1975. ISSN 0375-9474. (Cité page 24.)
- Toshio Motoba, Petr Bydžovský, Miloslav Sotona, et Kazunori Itonaga. [Spectroscopy of Electro- and Photo-Productions of Hypernuclei](#). *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 185 :224–251, 2010. (Cité page 133.)
- K Nakamura. [Review of Particle Physics \(Particle Data Group\)](#). *J. Phys. G : Nucl. Part. Phys.*, 37(7A) :075021, 2010. (Cité page 29.)
- J. B. Natowitz, R. Wada, K. Hagel, T. Keutgen, M. Murray, A. Makeev, L. Qin, P. Smith, et C. Hamilton. [Caloric curves and critical behavior in nuclei](#). *Phys. Rev. C*, 65 :034618, Mar 2002. (Cité page 42.)
- H. Nifenecker et F. Malek. [Lambda attachment in fission : A probe of the necking dynamics](#). *Nuclear Physics A*, 531(3-4) :539 – 554, 1991. ISSN 0375-9474. (Cité page 130.)
- K. Niita, N. Matsuda, Y. Iwamoto, H. Iwase, T. Sato, H. Nakashima, Y. Sakamoto, et L. Sihver. [PHITS : Particle and Heavy Ion Transport code System, Version 2.23](#). *JAEA-Data/Code*, 2010. (Cité page 50.)
- P. R. O'connor et G. T. Seaborg. [High Energy Spallation and Fission Products of Uranium](#). *Phys. Rev.*, 74 :1189–1190, Nov 1948. (Cité page 5.)
- S. Pedoux. [Extension of the Liège Intranuclear Cascade Model to the 2-15 GeV Incident Energy Range](#). *Thèse, Université de Liège*, 2011. (Cité pages 51 et 127.)
- S. Pedoux, A. Boudard, J. Cugnon, J.-C. David, S. Leray, et D. Mancusi. [The extension of the INCL model for simulation of shielding in space](#). *Advances in Space Research*, 48(2) :383 – 389, 2011. ISSN 0273-1177. (Cité page 125.)
- Sophie Pedoux et Joseph Cugnon. [Extension of the Liège intranuclear cascade model at incident energies between 2 and 12 GeV. Aspects of pion production](#). *Nuclear Physics A*, 866(1) :16 – 36, 2011. ISSN 0375-9474. (Cité page 51.)

- Denise B. Pelowitz. MCNPX User's Manual - Version 2.5.0. *LA-CP-05-0369*, 2005. (Cité pages 49 et 114.)
- Denise B. Pelowitz. MCNPX User's Manual - Version 2.6.0. *LA-CP-07-1473*, 2008. (Cité page 86.)
- W. Pohorecki, J.-C. David, G. Domanska, D. Doré, J. Janczyszyn, S. Leray, et D. Ridikas. [Thick lead target exposed to 660 MeV protons : benchmark model on radioactive nuclides production and heat generation, and beyond](#). *EDP Sciences*, (322) :1225 – 1228, 2007. ISSN 978-2-7598-0091-9. (Cité pages x, 85 et 123.)
- Władysław Pohorecki, Jerzy Janczyszyn, Stefan Taczanowski, Igor V. Mirokhin, Alexander G. Molokanov, Grażyna Domańska, et Tomasz Horwacik. [Evaluation of an ADS lead target activation : Comparison of computations and measurements](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 562(2) :750 – 754, 2006. ISSN 0168-9002. (Cité pages 9 et 49.)
- R.E. Prael. [User guide to LCS : the LAHET code system](#). *LA-UR-89-3014*, 1989. (Cité pages vii, 44 et 45.)
- R.E. Prael. Release notes for lahet code system with LAHET™ version 3.16. *LA-UR-01-1655*, 2001. (Cité pages 27, 34 et 46.)
- R.E. Prael et M. Bozoian. Adaptation of the Multistage Preequilibrium Model for the Monte Carlo Method. *LA-UR-88-3238*, 1988. (Cité page 46.)
- R.E. Prael et M.B. Chadwick. [Applications of Evaluated Nuclear Data in the LAHET™ CODE](#). *LA-UR-97-1744*, 1997. (Cité pages vi et 33.)
- K. Pysz, I. Zychor, T. Hermes, M. Hartmann, H. Ohm, P. Kulesa, W. Borgs, H.R. Koch, R. Maier, D. Prasuhn, Z. Rudy, B. Kamys, W. Cassing, J. Pfeiffer, Y. Uozumi, L. Jarczyk, A. Strzalkowski, et O.W.B. Schult. [Measurement of the lifetime of heavy  \$\Lambda\$  hypernuclei with the recoil shadow method and internal targets in the storage ring COSY-Jülich](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 420(1-2) :356 – 365, 1999. ISSN 0168-9002. (Cité page 130.)
- B. Rapp, J.-C. David, V. Blideanu, D. Doré, D. Ridikas, et N. Thiollière. [Benchmark calculations on particle production within the EURISOL DS project](#). *EURISOL DS/Task5/TN-06-04*, 2006. (Cité pages vii, xv, 56, 57, 82 et 141.)
- B. Rapp, J.-C. David, V. Blideanu, D. Doré, D. Ridikas, et N. Thiollière. [Shielding Aspects of Accelerators, Targets and Irradiation Facilities Eighth Meeting \(SATIF-8\)](#). *NEA/NSC/DOC(2010)6*, page 251, 2010. (Cité pages xii, 105 et 106.)
- C. Rubbia, J.A. Rubio, S. Buono, F. Carminati, N. Fiétier, J. Galvez, C. Gelès, Y. Kadi, R. Klapisch, P. Mandrillon, J.P. Revol, et Ch. Roche. [Conceptual design of a fast neutron operated high power energy amplifier](#). *Preprint CERN/AT/95-44 (ET)*, 1995. (Cité page 4.)
- Z. Rudy. [NON-MESONIC HYPERON DECAY IN HEAVY HYPERNUCLEI](#). *Habilitation - Report No. 1811/PH*, 1999. (Cité pages xiv, xv, 130, 131 et 132.)

- Z. Rudy et A. Kowalczyk. [Proton induced spallation reactions investigated within the framework of BUU model](#). *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions*, pages 53–64, 2008. (Cité pages 12 et 15.)
- F. Salvat, J. M. Fernández-Varea, et J. Sempau. *PENELOPE-2006, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*. OECD ISBN 92-64-02301-1, Spain, 2006. (Cité page 92.)
- Massimo Salvatores et Éric Fort. [Améliorer et compléter les données nucléaires indispensables aux neutroniciens](#). *CLEFS CEA N° 45*, pages 22– 29, 2001. (Cité page 44.)
- K. H. Schmidt, H. Delagrange, J. P. Dufour, N. Cârjan, et A. Fleury. [Influence of shell structure and pairing correlations on the nuclear state density](#). *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 308 :215–225, 1982. ISSN 0939-7922. 10.1007/BF01418283. (Cité pages 21 et 36.)
- K.-H. Schmidt, M.V. Ricciardi, A.S. Botvina, et T. Enqvist. [Production of neutron-rich heavy residues and the freeze-out temperature in the fragmentation of relativistic  \$^{238}\text{U}\$  projectiles determined by the isospin thermometer](#). *Nuclear Physics A*, 710(1-2) :157 – 179, 2002. ISSN 0375-9474. (Cité page 42.)
- S. Schnetzer, R. M. Lombard, M.-C. Lemaire, E. Moeller, S. Nagamiya, G. Shapiro, H. Steiner, et I. Tanihata. [Inclusive production of  \$K^+\$  mesons in 2.1-GeV/nucleon nuclear collisions](#). *Phys. Rev. C*, 40 :640–653, Aug 1989. (Cité pages xiv et 132.)
- Dorothea Schumann, Rolf Michel, Gunther Korschinek, Klaus Knie, et Jean-Christophe David. [Excitation functions for the production of  \$^{60}\text{Fe}\$  and  \$^{53}\text{Mn}\$  in the reaction  \$^{nat}\text{Pb}\(p,xp/yn\)Z\$](#) . *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A : Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 562(2) :1057 – 1059, 2006. (Cité page 96.)
- Dorothea Schumann, Jörg Neuhausen, Rolf Michel, Vasily Alfimov, Hans-Arno Snyal, Jean-Christophe David, et Anton Wallner. [Excitation functions for the production of long-lived residue nuclides in the reaction  \$^{nat}\text{Bi}\(p;xn,yp\)Z\$](#) . *Journal of Physics G : Nuclear and Particle Physics*, 38(6) :065103, 2011. (Cité pages xi, 96 et 97.)
- G. T. Seaborg et I. Perlman. [Table of Isotopes](#). *Rev. Mod. Phys.*, 20 :585–667, Oct 1948. (Cité page 5.)
- R. Serber. [Nuclear Reactions at High Energies](#). *Phys. Rev.*, 72 :1114–1115, Dec 1947. (Cité pages 4, 5, 11 et 15.)
- S. Shlomo et J. B. Natowitz. [Temperature and mass dependence of level density parameter](#). *Phys. Rev. C*, 44 :2878–2880, Dec 1991. (Cité page 21.)
- Arnold J. Sierk. [Macroscopic model of rotating nuclei](#). *Phys. Rev. C*, 33 :2039–2053, Jun 1986. (Cité page 23.)
- Y. Song, A. Margaryan, A. Acha, A. Ahmidouch, D. Androic, A. Asaturyan, R. Asaturyan, O. Baker, P. Baturin, F. Benmokhtar, R. Carlini, X. Chen, M. Christy, L. Cole, S. Danagoulian, A. Daniel, V. Dharmawardane, K. Egiyan,

- M. Elaasar, R. Ent, H. Fenker, Y. Fujii, M. Furic, L. Gan, D. Gaskell, A. Gasparian, E. Gibson, N. Grigoryan, P. Gueye, R. Halkyard, O. Hashimoto, D. Honda, T. Horn, B. Hu, S. Hu, Ed. Hungerford, M. Ispiryan, K. Johnston, M. Jones, N. Kalantarians, M. Kaneta, F. Kato, S. Kato, D. Kawama, C. Keppel, S. Knyazyan, Y. Li, W. Luo, D. Mack, G. Marikyan, N. Maruyama, A. Matsumura, T. Miyoshi, A. Mkrтчyan, H. Mkrтчyan, S. Nakamura, T. Navasardyan, G. Niculescu, M. Niculescu, H. Nomura, K. Nonaka, A. Ohtani, Y. Okayasu, P. Pamela, L. Parlakyan, N. Perez, T. Petkovic, S. Randeniya, J. Reinhold, R. Rivera, J. Roche, V. Rodriguez, Y. Sato, T. Seva, N. Simicevic, G. Smith, M. Sumihama, V. Tadevosyan, T. Takahashi, H. Tamura, L. Tang, V. Tvaskis, H. Vardanyan, W. Vulcan, B. Wang, S. Wells, S. Wood, C. Yan, et L. Yuan. [Kaon, pion, and proton associated photofission of Bi nuclei](#). *Physics of Atomic Nuclei*, 73 : 1707–1712, 2010. ISSN 1063-7788. (Cité pages 131 et 133.)
- A. Stankovskiy, S. Kerhoas-Cavata, R. Ferrand, et C. Nauraye. Monte Carlo simulation of a proton therapy beam line for head and neck tumor treatment. Dans *Eighth International Topical Meeting on Nuclear Applications and Utilization of Accelerators*, volume 1, pages 349 – 356, 2007. (Cité page 92.)
- E.A. Straker. Morse code : A multigroup neutron and gamma-ray monte carlo transport code. *ORNL-4585*, 1970. (Cité page 44.)
- R. K. Su, H. Q. Song, et T. T. S. Kuo. [Speed of sound in asymmetric nuclear matter with Skyrme interactions](#). *Phys. Rev. C*, 37 :1770–1773, Apr 1988. (Cité page 25.)
- H. Takada et K. Kosako. [Development of the DCHAIN-SP code for analyzing decay and build-up characteristics of spallation products](#) . *JAERI-Data/Code 1999-008*, 1999. (Cité page 96.)
- Y. Tall, S. Cormon, M. Fallot, Y. Foucher, A. Guertin, T. Kirchner, L. Zanini, M. Andersson, K. Berg, H. Frånberg, F. Gröschel, E. Manfrin, W. Wagner, M. Wohlmuther, P. Everaerts, U. Köster, H. Ravn, E. Noah Messomo, C. Jost, et Y. Kojima. [Volatile elements production rates in a proton-irradiated molten lead-bismuth target](#). In *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, April 22-27, 2007, Nice, France, editors O.Bersillon, F.Gunsing, E.Bauge, R.Jacqmin, and S.Leray, EDP Sciences*, pages 1069–1072, 2008. (Cité pages xiii, 11, 111, 115 et 116.)
- S. Taylor. [A study of recent improvements in spallation reaction models](#). *Rapport Interne*, IRFU-10-155, 2010. (Cité pages ix, xvii, 82 et 158.)
- Nicolas Thiollière, Luca Zanini, Jean-Christophe David, Jost Eikenberg, Arnaud Guertin, Alexander Yu. Konobeyev, Sébastien Lemaire, et Stefano Panebianco. [Gas Production in the MEGAPIE Spallation Target](#). *Nuclear Science and Engineering*, 169(2) :178–187, 2011. (Cité pages xiii et 113.)
- J. Toke et W.J. Swiatecki. [Surface-layer corrections to the level-density formula for a diffuse Fermi gas](#). *Nuclear Physics A*, 372(1-2) :141 – 150, 1981. ISSN 0375-9474. (Cité page 21.)
- E. A. Uehling et G. E. Uhlenbeck. [Transport Phenomena in Einstein-Bose and Fermi-Dirac Gases. I](#). *Phys. Rev.*, 43 :552–561, Apr 1933. (Cité page 14.)

- J.L. Ullmann, A. Gavron, J. King, R. Laird and D. Mayo, L. Waters, C. Zoeller, P. Staples, D. Jagnow, J. Koster, P.W. Lisowski, R.O. Nelson, S.A. Wender, G. Butler, R. Gritzo, M.A. Yates, M. Fowler, J. Wilhelmy, W. Wilson, C.E. Laird, et D.H. Mullins. [APT RADIONUCLIDE PRODUCTION EXPERIMENT](#) . *Pre-print LA-UR- 95-3327*, 1995. (Cité page 9.)
- K. van der Meer, M.B. Goldberg, E.H. Lehmann, H. Aït Abderrahim, D. Bar, D. Berkovits, M. Daum, S. Dekelver, Y. Foucher, J. Gerber, F. Van Gestel, W. Hajdas, H.-P. Linder, E. Malambu, I. Mardor, J. Oeyen, D. Saphier, A. Shor, M. Willekens, et Y. Yariv. [Spallation yields of neutrons produced in thick lead/bismuth targets by protons at incident energies of 420 and 590 MeV](#). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B : Beam Interactions with Materials and Atoms*, 217(2) :202 – 220, 2004. ISSN 0168-583X. (Cité pages 5 et 9.)
- C. Varignon. Contribution à l'étude expérimentale des neutrons de spallation produits par des protons dans des cibles épaisses. *Thèse de doctorat, Université de Caen*, 1999. (Cité pages 9 et 79.)
- C. Villagrasa-Cantón. Étude de la production des noyaux résiduels dans la réaction de spallation Fe+p à 5 énergies (300-1500 MeV/A) et application au calcul de dommages sur une fenêtre de système hydride. *Thèse de doctorat, Université Paris XI Orsay*, 2003. (Cité pages 4 et 9.)
- S. Vuillier. Simulations pour la transmutation des déchets par réacteurs hybrides. *Thèse de doctorat, Université Paris VII*, 1998. (Cité page 4.)
- Y. Watanabe, K. Kosako, S. Kunieda, S. Chiba, R. Fujimoto, H. Harada, M. Kawai, F. Maekawa, T. Murata, H. Nakashima, K. Niita, N. Shigyo, S. Shimakawa, N. Yamano, et T. Fukahori. [Status of JENDL High Energy File](#). *J. Korean Phys. Soc.*, 59 :1040–1045, 2011. (Cité pages xi et 94.)
- V. Weisskopf. [Statistics and Nuclear Reactions](#). *Phys. Rev.*, 52 :295–303, Aug 1937. (Cité pages 21 et 22.)
- V. F. Weisskopf et D. H. Ewing. [On the Yield of Nuclear Reactions with Heavy Elements](#). *Phys. Rev.*, 57 :472–485, Mar 1940. (Cité page 22.)
- Gy. Wolf, W. Cassing, et U. Mosel. [Eta and dilepton production in heavy-ion reactions](#). *Nuclear Physics A*, 552(4) :549 – 570, 1993. ISSN 0375-9474. (Cité page 131.)
- Y. Yariv, Th. Aoust, A. Boudard, J. Cugnon, J.C. David, S. Lemaire, et S. Leray. [Intra-nuclear cascade models at low energy ?](#) . *In Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, April 22-27, 2007, Nice, France, editors O.Bersillon, F.Gunsing, E.Bauge, R.Jacqmin, and S.Leray, EDP Sciences*, pages 1125–1128, 2008. (Cité pages vi, 16, 17 et 32.)
- Y. Yariv et Z. Fraenkel. [Intranuclear cascade calculation of high-energy heavy-ion interactions](#). *Phys. Rev. C*, 20 :2227–2243, Dec 1979. (Cité page 46.)
- Y. Yariv et Z. Fraenkel. [Intranuclear cascade calculation of high energy heavy ion collisions : Effect of interactions between cascade particles](#). *Phys. Rev. C*, 24 : 488–494, Aug 1981. (Cité page 46.)

L. Zanini, J.-C. David, A. Yu. Konobeyev, S. Panebianco, et N. Thiollière. [Neutronic and Post-test Analysis of MEGAPIE](#). *PSI Reort 08-04*, 2008. ISSN 1019-0643. (Cité pages xiii et 111.)





**Titre** Spallation :  
comprendre *pour* prédire !?

**Résumé** Ce mémoire de HDR traite d'une dizaine d'années de travaux autour de la modélisation des réactions de spallation. Ces réactions sont définies comme l'interaction nucléaire entre une particule légère, le plus souvent un nucléon, et un noyau atomique à une énergie de l'ordre de 100 MeV à 2-3 GeV. Deux étapes les caractérisent. Une phase rapide, la réaction directe appelée aussi cascade intranucléaire, et une phase plus lente, la désexcitation du noyau issu de la première phase. À partir de l'association du code développé par le groupe pour la cascade, INCL4, et du code de désexcitation Abla, de GSI, sont présentés les différentes facettes des réactions de spallation. D'abord la physique et les codes sont présentés, ce sont ensuite les différents types de validations des modèles qui sont exposés, puis les multiples domaines dans lesquels la modélisation de la spallation joue un rôle, pour enfin, tirant profit de tout ce qui aura été dit et d'autres travaux passés, montrer les différents voies qu'il reste à explorer ou redécouvrir.

**Mots-clés** spallation, modélisation, nucléon, méson, noyau, cible, étrangeté, code de transport, validation, application, accélérateur, ADS, source de neutron, radioactif, météorite

**Title** Spallation :  
understanding *for* predicting !?

**Abstract** This HDR report summarizes about ten years spent around spallation reaction modelling. Spallation reactions are defined as interaction of a light particle, say a nucleon, and a nucleus at an incident energy from 100 MeV up to 2-3 GeV. These reactions are divided in two steps. A first and fast phase, direct reactions also called intranuclear cascade, following by a slower phase, deexcitation of the remnant nucleus. Using the combination of INCL4, the intranuclear cascade model developed by the group, and the deexcitation code Abla from GSI, as a connecting thread, the multi-faceted spallation is presented. Chapter one deals with physics and codes, then different types of benchmarks are addressed, followed by several domains where spallation modelling plays a role, and finally, taking advantage of what has been said previously and of what can be read in the literature, new developments are suggested.

**Keywords** spallation, modelling, nucleon, meson, nucleus, target, strangeness, transport code, benchmark, application, accelerator, ADS, neutron source, radioactive, meteorite