

Recruteur	CEA
Ville	, Bouches-du-Rhône
Référence	2024-33531-S1547
Titre de l'offre	Post-Doctorat - Post-Doc - Modélisation de l'Interaction Électrons-Ions dans les Liquides à 2 Température H/F
Description de la mission	<p>La Direction des Applications Militaires (DAM) du CEA, au coeur des enjeux de la dissuasion nucléaire Française, cherche ses futurs talents. Organisme inclusif, le CEA est handi-accueillant : nos emplois sont ouverts à toutes et tous. Associer les forces et les compétences de chacun pour atteindre nos objectifs est l'une de nos valeurs partagée par nos 4 600 salariés, répartis sur 5 centres. Les 1 800 salariés du centre de Bruyères-le-Châtel, en Ile de France relèvent les défis scientifiques et technologiques au service de notre Sécurité Nationale. Le centre conçoit les charges nucléaires des armes de la dissuasion, garantit leur sécurité et leur fiabilité en s'appuyant sur le programme simulation. Il met son expertise technique au service des activités dans la lutte contre la prolifération nucléaire, le terrorisme et les alertes en cas de séisme ou de tsunami. Il assure l'ingénierie des infrastructures complexes de la DAM, de leur conception à leur démantèlement. Il co-développe avec Atos les supercalculateurs au meilleur niveau mondial, dont sont issus ceux du Très Grand Centre de Calcul du CEA, qu'il exploite pour ses missions Défense et gère au profit de la recherche. Enfin, il exploite les installations nécessaires au maintien en condition opérationnelle et à la conception des chaufferies nucléaires embarquées sur les sous-marin et les porte-avions. Venez-vous investir et relever des défis avec des moyens technologiques d'exception ! L'évolution temporelle des températures électronique et ionique peut être décrite par des équations de transfert d'énergie, dans un modèle dit 'à deux températures' (Two Temperature Model, i.e. TTM). Le taux de transfert de chaleur est pris en compte par la diffusion électron-phonon et le couplage électron-phonon est une entrée cruciale pour le TTM. À l'heure actuelle, il existe toujours une controverse sur la description de cette constante de couplage pour les systèmes à deux températures lorsqu'ils passent de l'état solide à l'état liquide, puis plasma. Au cours de cette transformation, la matière atteint des conditions extrêmes de température (jusqu'à ~30000K) et de pression (jusqu'à ~100GPa). Cela constitue un défi pour les calculs théoriques modélisant l'évolution temporelle de la structure électronique. L'approche de la physique des solides considère que la cinétique électronique est transférée aux degrés de liberté des ions liés, décrits comme des phonons. D'un autre côté, les approches de physique des plasmas considèrent la diffusion des électrons avec les plasmons. Récemment, de nouvelles formulations ont été proposées en utilisant la DFT dépendante du temps. Au cours de ce post-doc, il sera nécessaire d'établir la formulation du couplage électron-ion, adaptée à la matière dense et chaude, en partant des publications les plus récentes. Cette formulation sera ensuite mise en oeuvre dans un code 'premiers principes', le logiciel ABINIT, un projet international collaboratif développé dans notre laboratoire (www.abinit.org). Enfin, il faudra réaliser des simulations de dynamique moléculaire basées sur la DFT, en utilisant les supercalculateurs massivement parallèles du CEA, afin d'obtenir le couplage électron-phonon pour les métaux à deux températures dans des conditions extrêmes. Tout cette étude sera réalisée en étroite collaboration avec des équipes de physiciens expérimentateurs. Conformément aux engagements pris par le CEA en faveur de l'intégration des personnes en situation de handicap, cet emploi est ouvert à tous et toutes. Participant à la protection nationale, une enquête administrative est réalisée pour tous les salariés du CEA afin d'assurer l'intégrité et la sécurité de la nation. Solide expertise en physique des solides, et notamment en simulation numérique. Bonne connaissance en programmation. Linux, Fortran, Abinit, Programmation parallèle</p> <p>Post-doc Pour postuler cliquer ici.</p>
Type de contrat	Stage
Télétravail	Non spécifié
Profil	Ingénieur(e) Biotechnologies
Localisation	, Ile-de-France
Pays	France
Expérience	Expérimenté (3-10 ans)
Profil	Ingénieur(e) Biotechnologies

Fonction Ingénieur(e) Biotechnologies
Secteur Ingénierie – R&D