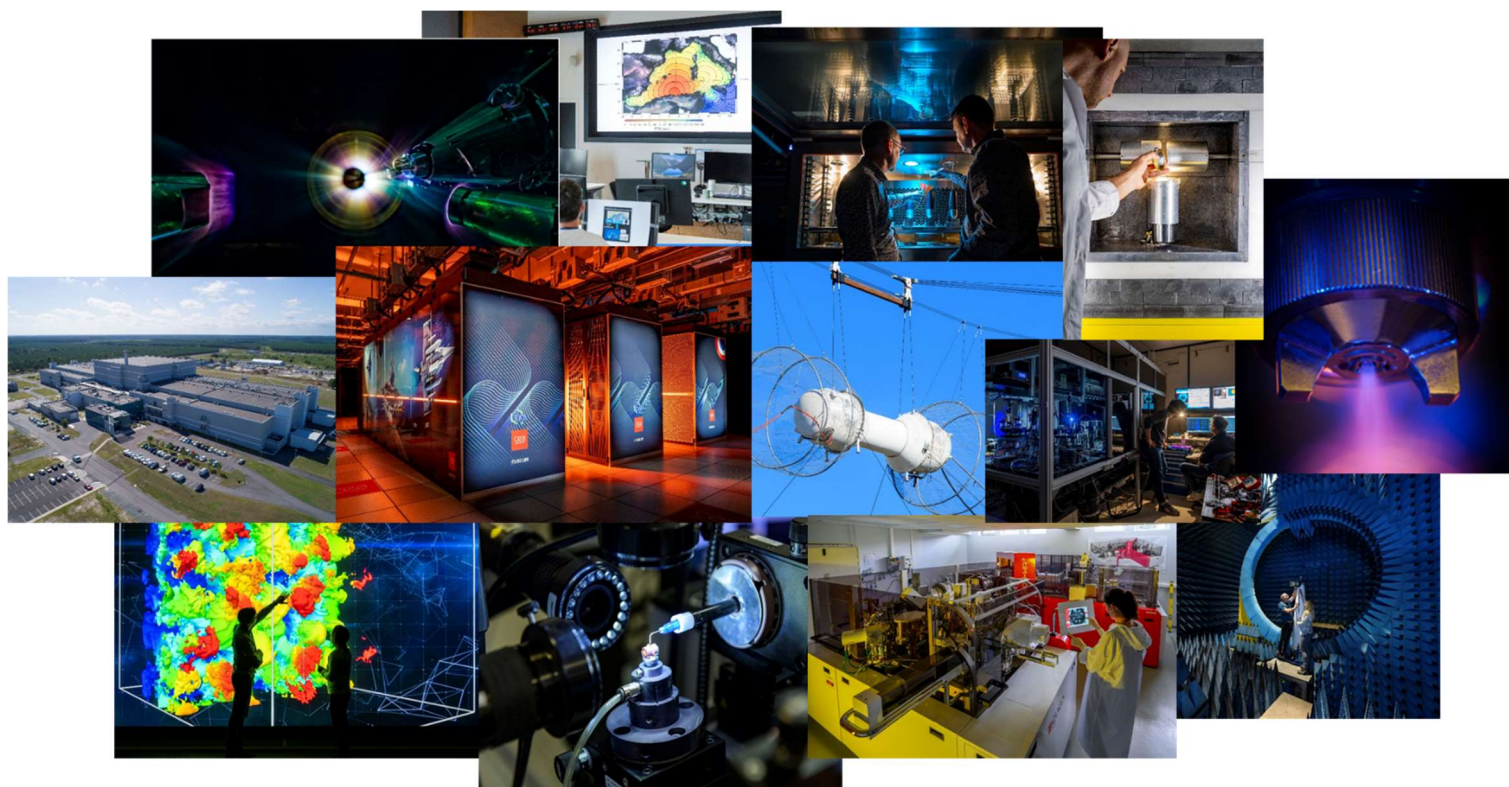




OFFRES de POST-DOCTORATS 2026



Liens utiles :

<https://www.cea.fr/>

<https://www-dam.cea.fr/>

<https://instn.cea.fr/post-doctorat>

<https://www.emploi.cea.fr/>

[E-mail \(candidature spontanée\) : stage-DAM@cea.fr](mailto:stage-DAM@cea.fr)

MISSION  ANDICAP



Vous terminez votre thèse et démarrez votre recherche active pour réaliser un post-doctorat ? Ce recueil est fait pour vous ! Il recense, classé par domaine de compétences, l'ensemble des sujets de post-doctorats proposés à ce jour par les équipes de la Direction des applications militaires (DAM) du Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA). **Toutes ces offres sont d'ores et déjà financées** par les projets auxquels les résultats obtenus contribuent.

S'ENGAGER POUR LA DÉFENSE ET LA SÉCURITÉ DE LA FRANCE

Depuis plus de 60 ans, les hommes et les femmes de la DAM contribuent, par leur engagement et leur sens du service, au maintien de la capacité de dissuasion de la France en relevant chaque jour des défis scientifiques et techniques pour assurer ensemble la réalisation des programmes de défense que leur confie l'Etat.

PARTICIPER À DE GRANDS PROJETS À LA POINTE DE LA SCIENCE ET DE LA TECHNOLOGIE

Vous aspirez à apporter votre contribution à de grandes missions de Défense tout en poursuivant une activité de recherche de haut niveau qui vous permettra de développer votre réseau et d'accroître votre expertise scientifique ? Rejoignez-nous ! Quel que soit le domaine scientifique ou technique qui vous intéresse, de la physique de la matière à la chimie en passant par les mathématiques appliquées, les sciences de l'information, l'optique, la mécanique des structures, la mécanique des fluides, l'électronique, la neutronique, le traitement du signal, la détection ou encore la propagation des ondes qu'elles soient électromagnétiques, infrasonores ou sismiques..., que vous soyez attiré(e) plutôt par la théorie, l'expérimentation, le numérique ou la technologie, le CEA/DAM peut vous proposer des sujets d'étude répondant à vos centres d'intérêt et à votre souhait de développement de compétences.

ACCÉDER À DES ÉQUIPEMENTS DE RECHERCHE AU MEILLEUR NIVEAU MONDIAL

Vous bénéficierez d'un environnement de recherche exceptionnel en termes de moyens disponibles : centres de calcul (EXA1, Très Grand Centre de Calcul...) équipés de calculateurs de classe exaflopique et d'outils logiciels nécessaires à leur utilisation intensive, développés en mode collaboratif et en open Source, moyens d'expérimentation dont les performances sont au meilleur niveau mondial, qu'ils soient de taille considérable comme le Laser MégaJoule couplé au laser Pétawatt PETAL implanté près de Bordeaux, ou que ce soit des installations de dimensions plus réduites et exploitées dans chacun des centres en fonction des thématiques scientifiques, moyens de recherche et développement de procédés en chimie qu'elle soit organique ou inorganique ou encore dans le domaine des matériaux, nucléaires ou non, moyens de caractérisation, moyens de test aux environnements...

SE FORMER ET CONSTRUIRE VOTRE PROJET PROFESSIONNEL

Dans de nombreux domaines scientifiques, vous pourrez bénéficier, pour réaliser les travaux de recherche et développement qui vous seront confiés, d'interactions avec plusieurs laboratoires et équipes en France ou à l'étranger en vous appuyant sur les nombreuses collaborations dans lesquelles les ingénieurs-chercheurs et techniciens du CEA/DAM sont des acteurs de premier plan. Celles-ci leur permettent d'être associés, en France ou à l'étranger, à des projets impliquant des équipes venues de différents pays, comme du co-développement d'outils logiciels ou des expériences, mais aussi d'être des acteurs majeurs du déploiement et de l'exploitation de réseaux internationaux comme par exemple le réseau international de surveillance déployé dans le cadre du traité d'interdiction complète des essais nucléaires... Cet environnement passionnant et stimulant est un formidable atout pour la réussite de vos travaux de thèse.

VALORISER VOS TRAVAUX

L'excellence scientifique et technique des équipes du CEA/DAM se matérialise également par une production scientifique considérable, d'environ 400 publications par an dans des revues internationales à comité de lecture de premier plan, par une capacité d'innovation concrétisée notamment par une trentaine de brevets déposés chaque année, par des logiciels informatiques en open source ou encore par des outils de simulation physique du meilleur niveau mondial développés en collaboration. Elle se traduit également par une très forte visibilité des équipes du CEA/DAM au sein du monde académique, grâce notamment aux collaborations déjà mentionnées avec les meilleures équipes françaises (implication dans des projets collaboratifs, participation aux groupes de recherche...) et internationales. Immergé(e) au sein de telles équipes, vous serez encouragé(e) à valoriser votre travail, au travers de présentations dans des séminaires, congrès, workshops, que ce soit en France ou à l'étranger, et de publications dans les revues à comité de lecture afin de donner à vos résultats toute la visibilité qu'ils méritent et ainsi mettre en lumière les compétences et connaissances que vous aurez développées et qui seront importantes pour votre futur parcours professionnel au CEA ou dans un autre organisme.

Les perspectives de recrutement sont toujours nombreuses au CEA/DAM, soutenues par des besoins importants d'ingénieurs et de docteurs en sciences et techniques liés d'une part aux départs en retraite et d'autre part à l'évolution des activités vers le développement et la maîtrise de techniques toujours plus pointues et à l'élargissement de la démarche de simulation à de nombreux projets. Pour être à même de réaliser, dans le respect des délais et avec le niveau de performances requis, l'ensemble des travaux nécessaires aux projets à long terme que l'Etat lui a confiés, le CEA/DAM s'appuiera sur des hommes et des femmes de talent, recrutés parmi les viviers constitués grâce à l'accueil régulier de stagiaires, alternant(e)s, doctorant(e)s et post-doctorant(e)s.

Je vous invite à parcourir avec attention le recueil des sujets de sujets de post-doctorat déjà disponibles à ce jour, que vous trouverez également sur le site Internet du CEA/DAM (<https://www-dam.cea.fr/>) Les offres sont par ailleurs publiées individuellement sur le site de l'INSTN (<https://instn.cea.fr/postdoctorat>) ainsi que sur le portail emploi du CEA (<https://www.emploi.cea.fr>) Prenez contact avec les responsables des sujets qui vous intéressent pour obtenir auprès d'eux des précisions et également échanger sur vos centres d'intérêt et les conditions de déroulement du travail de R&D proposé. De nouveaux sujets pourront être ajoutés au fil des mois, en fonction de l'avancée des travaux de recherche et développement menés et des besoins de recherche identifiés. Je vous encourage à consulter régulièrement les sites indiqués pour y trouver la mise à jour des listes de sujets proposés. Je vous précise que le financement est acquis pour tous les sujets publiés par le CEA/DAM.

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. Conformément aux engagements pris par le CEA en faveur de l'intégration des personnes en situation de handicap, les offres de postes au CEA sont ouvertes à tous et toutes.

A très bientôt au CEA/DAM !

Laurence BONNET
Chargée de mission relations école/université
et formation par la recherche

Les centres CEA / DAM

LE RIPAULT

37260 Monts

02.47.34.40.00

<http://www-dam.cea.fr/ripault>

DAM ÎLE-DE-FRANCE

Bruyères-le-Châtel

91297 Arpajon

01.69.26.40.00

<http://www-dam.cea.fr/damidf>

CESTA

BP2

33114 Le Barp

05.57.04.40.00

<http://www-dam.cea.fr/cesta>

VALDUC

21120 Is-sur-Tille

03.80.23.40.00

<http://www-dam.cea.fr/valduc>

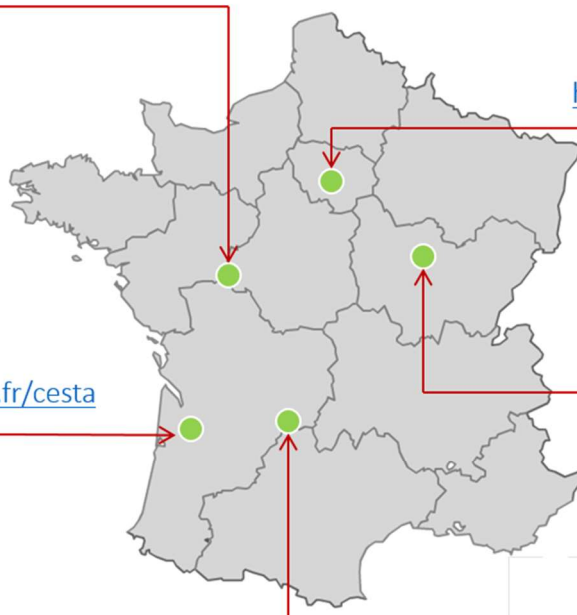
GRAMAT

BP 80000

46500 Gramat

05.65.10.54.32

<http://www-dam.cea.fr/gramat>



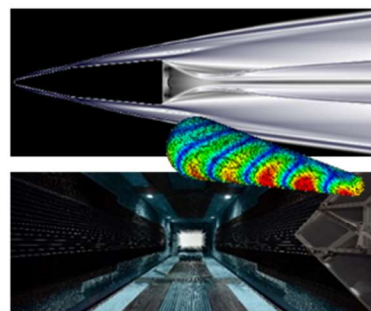
Le CEA/Cesta

Centre d'études scientifiques et techniques d'Aquitaine

Site Web : <https://www-dam.cea.fr/cesta>

Le CESTA est un des 5 centres de recherche et de développement technologique de la Direction des Applications Militaires du CEA. Il rassemble 1000 salariés sur un site de 700 hectares au cœur de la Nouvelle Aquitaine, au sud de la Gironde, entre Bordeaux et Arcachon.

Le CESTA assure la conception d'ensemble des têtes nucléaires de la force de dissuasion française à partir de **méthodes d'ingénierie collaborative intégrée**. Le CESTA est également responsable de la démonstration de fiabilité, de sûreté et de performance (tenue aux environnements, furtivité, rentrée atmosphérique), dans une démarche de simulation. Ce triptyque « modélisation/calculs/essais » s'appuie sur des **modélisations physiques de haut niveau**, des **calculateurs parmi les plus puissants au monde** et un **parc exceptionnel de moyens d'essais**.



Le CESTA dispose de la **plus grande installation laser d'Europe, LMJ/PETAL** (Laser MégaJoule/PETawatt Aquitaine Laser), instrument de recherche **unique** qui permet d'étudier la matière dans des conditions extrêmes de température et de pression, représentatives du fonctionnement des armes nucléaires et du cœur des étoiles. Pour cela, le CESTA accueille une **expertise reconnue mondialement, en conception laser, en technologie des composants optiques, en informatique industrielle...**

Une politique scientifique dynamique

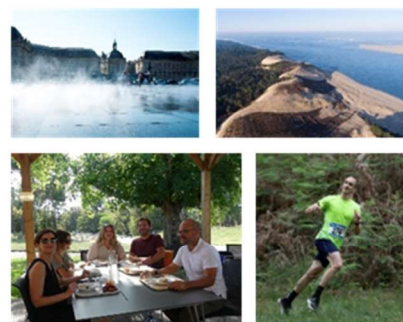
Pour mener à bien les missions dont il a la responsabilité et anticiper les évolutions nécessaires aux programmes futurs, le CESTA développe une politique scientifique dynamique et ambitieuse. Elle a donné naissance à un réseau collaboratif avec de multiples partenariats académiques et industriels qui permet notamment de former de nombreux étudiants dans un cadre stimulant, sur des sujets variés, à la pointe de la technique.

Thématiques métiers

Simulation
Expérimentations
Optique
Dynamique
Contrôle
Conception
Sûreté
Sécurité
Nucéaire
Exploitation
Laser
Méthodes
Installations
Aérodynamique
Electromagnétisme
Modélisation
Optoélectronique

Le CESTA, une qualité de vie au TOP !

- Réseau de bus CEA, accès gares, covoiturage
- Restauration sur place
- Possibilité de télétravail
- Service de Conciergerie (courrier, pressing, panier du marché...)
- Associations culturelles et sportives
- Salle de sport et parcours santé



Stagiaires, alternants, doctorants, post-doctorants, en rejoignant le CESTA, vous bénéficierez de conditions idéales pour exprimer vos compétences et développer vos talents !

Le CEA/DAM Île-de-France (CEA DIF)

Site Web : <https://www-dam.cea.fr/damidf>

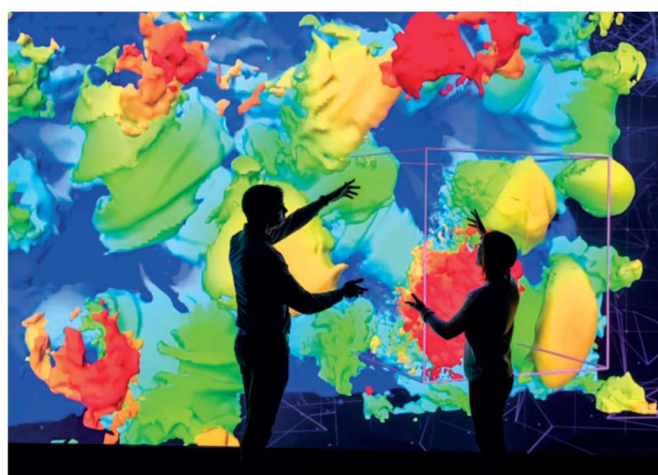
Le centre CEA DAM Île de France est un des cinq centres de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA. Ses 2 000 salariés – ingénieurs, chercheurs, techniciens, doctorants, partenaires... - sont mobilisés sur des missions au cœur de la dissuasion nucléaire française, ont en charge la surveillance de risques nationaux (terrorisme, séisme et tsunamis...) et du respect des traités internationaux, ou encore l'ingénierie de grandes installations pour la Défense. Le centre CEA DIF accueille également le Très Grand Centre de calcul du CEA, campus des savoir-faire en Calcul Haute Performance en France, et qui héberge les supercalculateurs de classe mondiale. Il est aussi responsable de l'Installation Nucléaire (INBS) située à proximité du centre CEA Cadarache.

À proximité immédiate du complexe scientifique du plateau de Saclay, le CEA DIF est en interaction directe avec l'Université Paris Saclay et l'Institut Polytechnique de Paris. Ses équipes proposent des thèses, stages ou alternances dans le domaine de l'informatique, des mathématiques, de la physique des plasmas, de la physique de la matière condensée, de la chimie, de l'électronique, de l'environnement ou encore de la géophysique.

LES MISSIONS

AU CŒUR DE LA DISSUASION NUCLÉAIRE

- La conception des armes nucléaires françaises, et la garantie de leur fiabilité et de leur sûreté, en s'appuyant sur le programme simulation.
- L'alerte auprès des autorités, 24h sur 24 et 365 jours par an, en cas d'essai nucléaire étranger, de séisme sur le territoire national et de séisme majeur à l'étranger, ainsi que de tsunami survenant dans la zone euro-méditerranéenne.
- La maîtrise d'œuvre d'ingénierie et l'assistance à maîtrise d'ouvrage pour la construction et le démantèlement d'ouvrages complexes.
- La lutte contre la prolifération et le terrorisme nucléaire en contribuant au respect du Traité d'interdiction complète des essais nucléaires (Tice) et du Traité de non-prolifération (TNP).



Simulation numérique

DES RESSOURCES INÉGALÉES

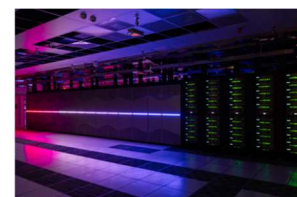
Le centre CEA DAM Île-de-France est aujourd'hui reconnu comme un leader européen en calcul numérique haute performance et en calcul intensif.



Supercalculateur Joliot-Curie du Très grand centre de calcul du CEA



Il exploite le Très grand centre de calcul du CEA (TGCC), ouvert à la communauté académique et industrielle. Le TGCC est l'un des composants du technopôle Teratec, premier espace français – et l'un des plus grands d'Europe – entièrement consacré à la simulation et au calcul haute performance.



Le CEA/Le Ripault

Site Web : <https://www-dam.cea.fr/ripault>



Un pôle de compétences unique pour l'étude et la conception de matériaux performants et innovants

Le CEA Le Ripault est situé à Monts, près de Tours, en Région Centre Val de Loire. Il rassemble, au profit de la Direction des applications militaires (DAM) du CEA, tous les métiers et les compétences scientifiques et techniques nécessaires à la mise au point de nouveaux matériaux et de systèmes, depuis leur développement jusqu'à leur industrialisation :



- Ingénierie moléculaire & Synthèse
- Microstructures & Comportements
- Conception & Calculs
- Prototypage & Métrologie
- Fabrication & Traitement de surface
- Caractérisation & Expertise

Missions : Les salariés du Ripault unissent leurs compétences et leurs talents pour :

RÉPONDRE AUX ENJEUX DE LA DISSUASION NUCLÉAIRE

- Armes nucléaires
- Lutte contre la prolifération nucléaire
- Réacteurs nucléaires de propulsion navale

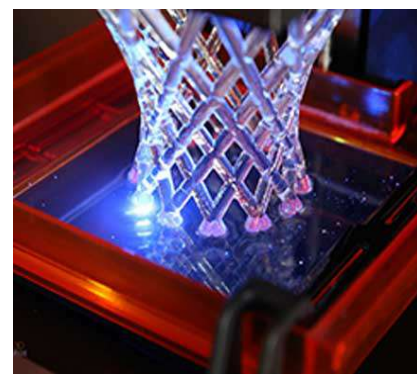
SURVEILLER, ANALYSER ET INTERVENIR POUR LA SÉCURITÉ

CONTRIBUER À L'EXCELLENCE DE LA RECHERCHE ET À LA COMPÉTITIVITÉ DE L'INDUSTRIE

Le CEA/Le Ripault propose des stages, alternances, thèses et des post-doctorats d'excellence dans les domaines des matériaux organiques, céramiques et composites, de l'électromagnétisme, des systèmes énergétiques bas carbone, des procédés de fabrication innovants et dans celui des matériaux énergétiques.



Une plateforme d'innovation est à disposition des salariés pour y mener des projets transversaux autour de la qualité de vie au travail, de la sobriété énergétique et de l'industrie du futur...



Le CEA/Gramat

Site Web : <http://www-dam.cea.fr/gramat>

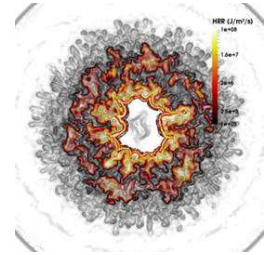
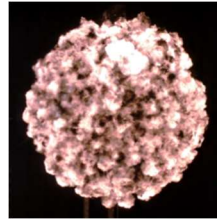
Gramat, la recherche au service de la Défense nationale

Situé dans la région Occitanie - Pyrénées Méditerranée, le site de Gramat compte 250 salariés et s'étend sur plus de 300 hectares.

Ses activités sont organisées autour de trois domaines d'applications : Dissuasion - Défense conventionnelle et Sécurité civile. Dans ces trois domaines, le CEA Gramat a la charge des études de vulnérabilité et de durcissement (capacité à résister à une agression) des systèmes d'armes face à des agressions nucléaires ou conventionnelles. A ce titre, il étudie notamment la vulnérabilité et la protection des installations vitales civiles et militaires de la nation.

Pour accomplir leurs missions, les équipes exploitent des moyens d'expertise de très haut niveau, qu'il s'agisse de simulations numériques haute performance ou de plateformes d'expérimentation physique uniques en France et en Europe.

Les domaines scientifiques étudiés sont très vastes et se rapportent à de nombreuses branches de la physique théorique ou expérimentale : mécanique des fluides et des structures, comportement dynamique des matériaux, détonique (science des explosifs), thermique, électromagnétisme, électronique, interactions rayonnement-matière, physique des plasmas, métrologie...



Vue expérimentale et simulation numérique d'une boule de feu (explosif en détonation)

Douceur de vivre

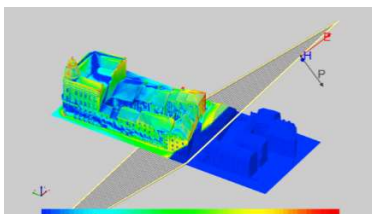
Le centre CEA Gramat est au cœur du Parc naturel régional des Causses du Quercy, situé entre Rocamadour et Padirac dans le Lot. Côté nature, des paysages typiques du Lot sont d'une grande diversité. Côté loisirs, randonnées, canoë sur la Dordogne, sport, culture, festivals... des activités pour tous les goûts.



Un rayonnement régional attractif

Afin de développer son niveau scientifique, le Centre s'appuie sur de nombreuses universités françaises (Limoges, Toulouse, Rennes...) et sur de grandes écoles d'ingénieurs (Ecole Polytechnique, Ecole des Mines...). Les ingénieurs du centre participent aux Pôles de compétitivité Aerospace Valley (Occitanie – Nouvelle Aquitaine, aéronautique, systèmes embarqués), et ALPHA Route des Lasers et Hyperfréquences (Nouvelle Aquitaine, lasers, micro-ondes et réseaux). Au niveau régional, le CEA Gramat développe ses partenariats avec les écoles doctorales et les laboratoires des régions proches. Cela se traduit par la création de Laboratoires de Recherche Conventionnés (LRC) permettant de renforcer les compétences de chacune des parties en matière de recherche académique et de recherche appliquée.

Ces collaborations se concrétisent par une récurrence d'une quinzaine de doctorants, d'une vingtaine d'apprentis et d'une vingtaine de stagiaires présents sur le site.



Simulation électromagnétique d'un quartier de ville



Chambre Anéchoïque

Les thèses proposées au CEA/Gramat concernent les domaines de l'électromagnétisme, de l'électronique, de la détonique (science des explosifs), de la dynamique des structures, de l'expérimentation et de la simulation numérique.

Le CEA/Valduc

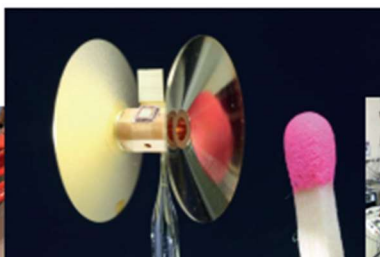
Site Web : <https://www-dam.cea.fr/valduc>

Valduc , un site de production unique !

Dédié à la fabrication des composants nucléaires des armes de la dissuasion, le CEA Valduc est à la fois un centre de recherche et un site industriel en évolution constante. Caractérisé par des produits de très haute valeur ajoutée et des procédés high-tech, il rassemble toutes les compétences et les moyens techniques nécessaires à l'accomplissement de sa mission, de la recherche de base sur les matériaux nucléaires aux procédés de fabrication et à la gestion des déchets.

Ses compétences sont principalement centrées sur la métallurgie de pointe, la chimie séparative et l'exploitation de grandes installations nucléaires.

Le centre accueille également l'installation radiographique franco-britannique Epure, dans laquelle sont réalisées des expériences hydrodynamiques.



Valduc, un cadre de vie exceptionnel !



L'existence d'une structure collaborative ouverte à tous contributeurs sur le centre permet le brassage d'idées au service de projets innovants dans un état d'esprit type Fab-Lab.

Un environnement épanouissant aux portes du Parc Régional de Bourgogne et à 45 mn de Dijon offre aux salariés des conditions de vie particulièrement agréables.

La qualité de vie au travail à Valduc, c'est aussi profiter des structures sportives, participer à des événements festifs (Tour du Centre, Fête de la Musique, Vœux, ...), bénéficier de services et d'offres (bibliothèque, spectacle, séjours sportifs, vacances...) grâce aux associations culturelles et sportives du centre.

Valduc, un attracteur de jeunes talents !

Au-delà des moyens classiques, Valduc mène de nombreux développements pour intégrer les dernières évolutions dans des domaines très variés* dans lesquels les jeunes en apprentissage ou en stage pourront se former et exprimer tout leur talent. Des sujets de thèse et de post-doctorat sont aussi proposés dans le cadre de collaborations étroites que le centre établit notamment avec l'Université de Bourgogne Franche Comté, l'Université de Toulouse, de Nancy, mais également en partenariat avec de nombreuses écoles (ESIREM, ENSAM, ENSMM, Mines de Nancy...).

* Physico-Chimie- Matériaux- Chimie organique et inorganique- Sécurité nucléaire - Soudage laser - Usinage d'ultraprécision - Fonderie - Mécanique- Microtechnologie - Calcul de structure - Bureau d'étude - Génie des procédés - Exploitation et maintenance de procédés chimiques - Mesures physiques - Radioprotection - Contrôle non destructif, dimensionnel - Maintenance électrotechnique & automatisme- Robotique et mécatronique - Infrastructures chauffage et fluides - Systèmes de vidéo contrôle - Supervision - Cybersécurité - Informatique- Ventilation nucléaire- Cryogénie



Valduc, se donner rendez-vous !

Intégrer le CEA Valduc, c'est avoir la perspective d'une carrière diversifiée dans des métiers de pointe ; c'est aussi donner un sens à son action, en contribuant à une mission au service de l'intérêt général.

Rendez-vous sur le site <http://www-dam.cea.fr/valduc> pour en savoir plus ou contactez-nous recrutement.valduc@cea.fr ou au 03 80 23 42 01 pour convenir d'un rendez-vous

LISTE DES THÉMATIQUES DES POST-DOCTORATS 2026

CHIMIE	Page 13
ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE	Page 17
INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE ET CONTRÔLE	Page 19
MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE	Page 21
MATHÉMATIQUES, INFORMATION SCIENTIFIQUE, LOGICIEL	Page 33
MÉCANIQUE ET THERMIQUE	Page 35
PHYSIQUE DE L'ÉTAT CONDENSÉ, CHIMIE ET NANOSCIENCES	Page 39
PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE	Page 41
PHYSIQUE THÉORIQUE	Page 47
SCIENCE DE LA TERRE ET DE L'ENVIRONNEMENT	Page 51
SCIENCES POUR L'INGÉNIEUR	Page 57

CHIMIE

CONTEXTE : L'oxydation d'amines hétéroaromatiques constitue encore un défi majeur en chimie organique, notamment pour les hétérocycles pauvres en électrons. Une meilleure compréhension des mécanismes sous-jacents permettrait d'expliquer les faibles rendements actuels et d'optimiser les conditions réactionnelles.

OBJECTIF : Ce projet vise à développer des modèles d'apprentissage automatique interprétables pour prédire et améliorer l'efficacité de ces réactions. Des données fiables seront générées par des expérimentations à haut débit (HTE), afin de contourner les limites des données issues de la littérature (manque de standardisation, manque de résultats négatifs etc.). Dans un premier temps, le travail portera sur la prédiction du rendement de réactions modèles (ex. aminopyrazoles) en fonction des paramètres expérimentaux. Ensuite, des calculs de structures électroniques et l'étude de sous-produits spécifiques (ex. aminofurazanes) permettront de proposer des mécanismes détaillés et d'orienter les optimisations. Enfin, ces connaissances seront appliquées à des amines encore récalcitrantes à l'oxydation, pour tester et valider les conditions identifiées. L'enjeu sera de représenter au mieux la complexité du système réactionnel (substrat, solvant, catalyseur, température, etc.) pour alimenter les algorithmes et en extraire des règles claires pour la synthèse. L'objectif final est de fournir aux chimistes des outils prédictifs pour rationaliser et développer ces transformations

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Ce projet est en collaboration entre le CEA/DAM Île-de-France et celui de Saclay. Les expériences HTE seront menées à Saclay dans le cadre d'un stage mené en amont et en parallèle du postdoc. La personne recrutée sera physiquement présente sur le centre CEA/DAM Île-de-France, dans une équipe de simulation moléculaire. Ce centre est accessible par navettes gratuites depuis Paris et ses environs.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Appétence pour le traitement des données expérimentales.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Python, machine learning.

DURÉE : 1 à 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	WESPISER Clément Email : clement.wespiser@cea.fr ROMERO Eugénie Email : eugenie.romero@cea.fr

CONTEXTE : L'une de nos missions est la conception de nouvelles compositions explosives aux propriétés optimisées. A ce titre, la recherche de nouvelles molécules d'intérêt, susceptibles d'être intégrées dans des formulations innovantes, est une activité fondamentale de nos laboratoires.

OBJECTIF : L'objectif de ce postdoctorat est de synthétiser, à l'échelle laboratoire, des molécules énergétiques présentant des structures à même de satisfaire le cahier des charges en termes de performance et d'insensibilité. Il s'agit principalement de molécules hétérocycliques fortement azotées (pyrazoles, triazoles, oxadiazoles...). Le travail comprendra à la fois la synthèse des intermédiaires, qu'ils soient considérés comme énergétiques ou non, et celle des produits finaux.

Cette démarche est adossée à des travaux de modélisation menés en amont, destinés à mettre en place des outils pour proposer de nouvelles structures et évaluer leurs propriétés par calcul. Ce sujet nécessitera, en interaction avec l'équipe de modélisation, d'utiliser ces outils et de les mettre à profit pour orienter le choix des cibles qui seront étudiées expérimentalement au laboratoire.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le déroulement du post-doctorat suit la logique classique en synthèse organique :

- travail bibliographique sur la thématique
- Pour chaque structure définie comme cible :
 - o mise en œuvre des différentes voies de synthèse identifiées
 - o réalisation des analyses de routine nécessaires

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Physico-chimie, Méthodes de caractérisation physico-chimique.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Chimie organique, Méthodes de synthèse organique et de purification

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CHIMIE

CENTRE	CONTACT
CEA/Le Ripault BP 16 – 37260 Monts Tél : 02-47-34-40-00 Email : stage.ripault@cea.fr	PASQUINET Eric Email : eric.pasquinet@cea.fr DANIEL Matthieu Email : matthieu.daniel@cea.fr

CONTEXTE : L'objectif principal de ce post-doctorat est de disposer d'un modèle prédictif fiable, élaboré sous Matlab, et validé par des données expérimentales, sur les gaz générés au cours de l'entreposage de produits contenant des radioéléments. En particulier, le(la) candidat(e) retenu(e) devra enrichir le modèle existant en étudiant la contribution des gaz générés par la radiolyse de l'eau et celle produite par réaction chimique dans les produits.

Après les formations nécessaires à la manipulation de radioéléments dans les installations du laboratoire, le(la) post-doctorant(e) devra reprendre les travaux en cours (bibliographie, conduite des essais, collaborations...).

OBJECTIF : Plusieurs actions doivent être approfondies :

- un modèle a été initié, qui prend en compte la production de gaz de radiolyse et les échanges gazeux entre les différentes parois des conteneurs d'emballage,
- des dispositifs de mesure sur produits réels sont opérationnels, il s'agira de poursuivre les mesures et leur exploitation,
- des moyens de mesure nouveaux ont été acquis, ils devront être qualifiés et exploités (micro-CG par exemple).

Il s'agit pour le(la) candidat(e) d'acquérir une expérience dans le domaine du nucléaire et plus particulièrement sur la radiolyse.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le post-doctorat se déroulera au CEA Valduc, avec une part du travail expérimental en zone réglementée pour la manipulation de radioéléments. Des collaborations seront nécessaires, en particulier pour la caractérisation des produits et des emballages (mesure de perméation par exemple).

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Docteur (ou Docteur Ingénieur) en chimie ayant des compétences dans un ou plusieurs de ces domaines : radiochimie, thermodynamique, matériaux, ATG. Le(la) candidat(e) devra être organisé(e), autonome, posséder des capacités rédactionnelles et savoir rendre compte (présentation en interne et en externe à des congrès par exemple). La rigueur et la capacité à intégrer et à mettre en application des règles strictes de sûreté-sécurité sont indispensables.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Matlab

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CHIMIE

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	FAURE Sébastien Email : sebastien.faure@cea.fr DALGER Thomas Email : thomas.dagler@cea.fr

ÉLECTROMAGNÉTISME, GÉNIE ÉLECTRIQUE

CONTEXTE : La Direction des applications militaires du CEA utilise la radiographie éclair pour caractériser l'état de la matière soumise à des chocs forts ou à une densification importante sous l'effet d'explosifs. Dans de telles conditions extrêmes, le succès des expériences de radiographie éclair nécessite des sources de rayonnement X impulsionnelles de faibles dimensions spatiales (quelques mm), brèves (environ 60 ns), fortement pénétrantes (quelques MeV) et intenses (plusieurs rads). De telles sources sont produites à partir du rayonnement de freinage créé par une impulsion brève et intense d'électrons (plusieurs kA) de haute énergie dans un matériau cible. L'installation radiographique EPURE du CEA exploite deux Accélérateurs Linéaires à Induction (LIA) comme sources de radiographie éclair.

OBJECTIF : Au sein d'un accélérateur à induction, l'injecteur est un dispositif de haute puissance pulsée qui permet la création d'un faisceau d'électrons pulsé (environ 60 ns), intense (typiquement 2 kA), de haute énergie (entre 2 et 4 MeV). Le CEA/DAM prévoit le déploiement d'un nouvel injecteur à induction. La topologie de cet injecteur est de type « push-pull » avec une zone de diode placée entre deux sections « Inductive Voltage Adder (IVA) », et un faisceau se propageant dans un tube, dit anodique, qui traverse la section IVA positive.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le sujet de post-doc proposé est d'étudier la géométrie optimale de la zone sous vide (panneau isolant, diode et tube anodique) pour produire un faisceau avec les performances requises. Les données externes sont : le profil temporel de l'impulsion électrique qui polarise la diode, les volumes disponibles et les matériaux adaptés au vide secondaire (< 10E-5 mbar). Les phénomènes à prendre en compte sont principalement : la tenue électrique des surfaces, la disposition des lignes de champs dans l'espace Anode-Cathode, les échanges avec la source électrique et la création des champs magnétiques pour le transport du faisceau dans le tube anodique. Pour ce dimensionnement, la modélisation numérique s'appuiera sur les outils numériques suivants : code de circuit de type « SPICE », des solveurs EM de type « CST » et un code « Particle-In-Cell » pour la propagation des électrons. Aussi, un volet « mesures » pourra être ajouté pour intégrer, dès la conception, des points de diagnostics électriques dans ce volume sous vide.

Au cours de ces travaux, des essais expérimentaux pourraient être nécessaires en utilisant des bancs de tests dédiés ou sur le Mini-Injecteur à Induction (MI2) opérationnel dans le laboratoire.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Profil recherché : docteur en physique appliquée avec connaissances en électromagnétisme. Facilité pour travailler en équipe.

DURÉE : 1 à 2 ans

Le post-doctorat se déroulera sur le site du **CEA/CESTA**, au BARP (33), au sud de Bordeaux.

CENTRE	CONTACT
CEA/Gramat BP 80200 – 46500 Gramat Tél : 05-65-10-54-32 Email : stage.gramat2@cea.fr	FOURMENT Claude Email : claud.fourment@cea.fr

INSTRUMENTATION, MÉTROLOGIE, CONTRÔLE

CONTEXTE : La rentrée atmosphérique d'un objet génère des phénomènes aérothermodynamiques complexes liés aux interactions entre l'objet en rentrée et l'atmosphère. Les capteurs actuels sont limités dans leur capacité à fournir des données précises et fiables pour l'étude de ces interactions. Des phénomènes couplés tels que les transferts thermiques, les transferts de masse, la dégradation thermique et mécanique des matériaux ainsi que la récession de paroi (ablation) qui en découlent sont autant de données à quantifier afin de valider une démarche de simulation.

OBJECTIF : L'objectif de ce projet de post-doctorat est de concevoir, développer et réaliser un capteur d'ablation innovant pour les environnements aérothermiques de rentrée atmosphérique. En premier lieu, une étude bibliographique permettra d'établir un état des lieux des capteurs existants. Après une sélection des concepts d'intérêt, le travail s'articulera sur la réalisation de prototypes qui seront utilisés sur des essais de bas niveau puis vers des essais sol combinant l'ensemble des physiques envisagées. Une fois que le concept sera validé sur ces essais sol, il sera miniaturisé pour les essais en vol.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : • Effectuer une étude bibliographique sur les capteurs existants et les techniques de mesure pour les environnements aérothermiques de rentrée atmosphérique. Qu'existe-il dans la communauté, avantages et inconvénients.

- Étudier les besoins en termes de mesures pour les environnements aérothermiques de rentrée atmosphérique.
- Concevoir un capteur innovant capable de fournir des données précises et fiables sur l'ablation.
- Développer un/des prototype(s) de capteur et les tester dans des conditions de laboratoire via l'utilisation des moyens à disposition sur le site et chez des industriels.
- Concevoir des essais aérothermiques au sol permettant d'évaluer le fonctionnement de celui-ci en le comparant avec des données de métrologie externe.
- Aider au développement de la chaîne de mesure pour le capteur.
- Aider à la miniaturisation pour l'emport sur objet de vol.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Doctorat en physique, génie mécanique ou domaine connexe.

Expérience en conception de capteurs et en instrumentation.

Expérience en miniaturisation de capteurs pour les essais en vol.

Expérience en développement de chaîne de mesure.

Capacité à travailler en équipe et à collaborer avec des experts de différents domaines.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Cesta BP 2 – 33114 Le Barp Tél : 05-57-04-40-00 Email : stage.cesta@cea.fr	LEDAIN Olivier Email : olivier.ledain@cea.fr

MATÉRIAUX, PHYSIQUE DU SOLIDE

CONTEXTE : Déterminer les propriétés d'un matériau en fonction de la température et de la pression constitue l'un des défis majeurs de la physique moderne. Dans ce contexte, les calculs ab initio jouent un rôle fondamental. Partant d'une description quantique de la structure électronique, ils permettent de caractériser la matière, y compris dans des conditions thermodynamiques extrêmes où aucune expérience n'est envisageable. Les simulations de dynamique moléculaire ab initio (AIMD) sont particulièrement adaptées pour prendre en compte les effets de température et de pression. Toutefois, ces simulations sont très coûteuses en ressources de calcul, ce qui limite leur utilisation à un nombre restreint de points thermodynamiques pour établir un diagramme de phase complet.

OBJECTIF : Nous avons récemment montré que les simulations AIMD peuvent être accélérées d'un facteur 100 en utilisant un potentiel interatomique ajusté par apprentissage automatique (MLIP) [1–3]. Cet échantillonnage accéléré de la distribution canonique à l'équilibre peut être suivi de calculs d'énergie libre via une intégration thermodynamique [4]. Cette stratégie d'apprentissage "à la volée" garantit une précision quasi équivalente à celle d'un calcul AIMD, et est désormais disponible dans le code Python MLACS, que nous développons et utilisons en production. Néanmoins, répéter de telles simulations des dizaines voire des centaines de fois pour échantillonner systématiquement un diagramme de phases reste extrêmement exigeant en termes de calculs, voire inenvisageable.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Au cours de ce projet postdoctoral, le.a candidat.e développera une stratégie d'échantillonnage optimale et automatisée. L'objectif est double : réduire le nombre de simulations MLACS nécessaires à la construction d'un diagramme de phases, et fournir une estimation de l'incertitude associée au diagramme obtenu. Il.elle s'appuiera sur des développements récents de la littérature [5, 6].

[1] A. Castellano, F. Bottin, J. Bouchet, A. Levitt, and G. Stoltz, Phys. Rev. B 106, L161110 (2022). // [2] A. Castellano, R. Béjaud, P. Richard, O. Nadeau, C. Duval, G. Geneste, G. Antonius, J. Bouchet, A. Levitt, G. Stoltz, and F. Bottin, Machine learning assisted canonical sampling (MLACS) (2024), arXiv:2412.15370 [cond-mat.mtrl-sci]. // [3] F. Bottin, R. Béjaud, B. Amadon, L. Baguet, M. Torrent, A. Castellano, and J. Bouchet, Phys. Rev. B 109, L060304 (2024). // [4] P. Richard, A. Castellano, R. Béjaud, L. Baguet, J. Bouchet, G. Geneste, and F. Bottin, Phys. Rev. Lett. 131, 206101 (2023). // [5] V. Ladygin, I. Beniya, E. Makarov, and A. Shapeev, Phys. Rev. B 104, 104102 (2021). // [6] T. Miryashkin, O. Klimanova, V. Ladygin, and A. Shapeev, Phys. Rev. B 108, 174103 (2023).

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	BOTTIN François Email : francois.bottin@cea.fr

CONTEXTE : En science des matériaux, la dynamique moléculaire ab initio (AIMD) constitue un outil central pour l'étude des propriétés à température finie. Toutefois, ces simulations restent fortement limitées par leur coût de calcul élevé, principalement en raison du calcul des forces ab initio et du grand nombre d'étapes nécessaires pour échantillonner la surface d'énergie. Une solution envisagée consiste à remplacer les simulations AIMD par des simulations « classiques » utilisant des potentiels interatomiques issus de l'apprentissage automatique (MLIP).

OBJECTIF : La méthode MLACS (Machine Learning Assisted Canonical Sampling) [1, 2] permet de réduire drastiquement le coût des simulations AIMD (d'environ deux ordres de grandeur), tout en maintenant une précision ab initio de l'ordre de 1 meV/atome [3, 4]. Elle repose sur une approche variationnelle auto-cohérente, combinée à un apprentissage actif, pour affiner itérativement un potentiel MLIP. Contrairement aux approches traditionnelles, MLACS génère à la fois un potentiel adapté au point thermodynamique ciblé, et une distribution représentative de configurations à l'équilibre.

Cependant, les matériaux magnétiques ne sont pas encore pris en charge. En particulier, l'intégration du degré de liberté de spin dans l'ajustement du potentiel MLIP [5, 6], ainsi que l'interaction entre spin et réseau, ne sont actuellement pas disponibles, alors que ces effets sont essentiels pour comprendre la stabilité des phases.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : L'objectif de ce projet postdoctoral est donc double :

- 1- accélérer les simulations ab initio, et
- 2- permettre le calcul des propriétés thermodynamiques des matériaux magnétiques (comme le fer [7]) au sein du package Mlacs.

[1] A. Castellano, F. Bottin, J. Bouchet, A. Levitt, et G. Stoltz, Phys. Rev. B 106, L161110 (2022). // [2] A. Castellano, R. Béjaud, P. Richard, O. Nadeau, C. Duval, G. Geneste, G. Antonius, J. Bouchet, A. Levitt, G. Stoltz, et F. Bottin, Machine learning assisted canonical sampling (MLACS) (2024), arXiv:2412.15370 [cond-mat.mtrl-sci]. // [3] P. Richard, A. Castellano, R. Béjaud, L. Baguet, J. Bouchet, G. Geneste, et F. Bottin, Phys. Rev. Lett. 131, 206101 (2023). // [4] F. Bottin, R. Béjaud, B. Amadon, L. Baguet, M. Torrent, A. Castellano, et J. Bouchet, Phys. Rev. B 109, L060304 (2024). // [5] M. Domina, M. Cobelli, et S. Sanvito, Phys. Rev. B 105, 214439 (2022). // [6] M. Rinaldi, M. Mrovec, A. Bochkarev, Y. Lysogorskiy, et R. Drautz, npj Comput. Mater. 10, 12 (2024). // [7] S. Nikolov, et al., Proc. Natl. Acad. Sci. 121, e2408897121 (2024).

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	BOTTIN François Email : francois.bottin@cea.fr

CONTEXTE : Plusieurs transformations de phase induites par la pression ont été prédites et observées dans l'étain ; son diagramme de phase reflète en effet sa position particulière du groupe IV dans le tableau périodique des éléments pour lesquels les éléments plus légers (C, Si, Ge) ont tendance à former des liaisons covalentes. Les propriétés thermodynamiques et mécaniques des différentes phases de l'étain ainsi que les transitions structurales sont assez bien connues aujourd'hui mais restent cependant difficiles à reproduire par les calculs de structure électronique.

Concernant les simulations de Dynamique Moléculaire (DM) classique, de nombreux potentiels ont été proposés dans la littérature permettant de reproduire certaines parties du diagramme de phase mais restent limités dans leurs capacités prédictives sur certaines propriétés dont les distorsions spécifiques des réseaux rencontrés lors de la déformation du matériau (formation de dislocation, maclage).

OBJECTIF : Ce projet vise à explorer le rôle des défauts structuraux sur le mécanisme de transition de phase beta-gamma en utilisant des simulations classiques de dynamique moléculaire à grande échelle.

Différents potentiels seront testés et/ou développés sur une base de données ab initio et validés par comparaison des données élémentaires (équation d'état, constantes élastiques, chemin de transition) par rapport aux données expérimentales et ab initio. Des simulations de grande taille seront ensuite mise en oeuvre pour observer le couplage entre les différents modes de déformation.

Les objectifs sont de quantifier le rôle du couplage entre les différents modes de déformation sur la transition beta-gamma.

Les compétences acquises seront la connaissance de méthodes de Dynamique Moléculaire, l'emploi du HPC, connaissance matériaux.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Evaluation des différents potentiels disponibles dans la littérature.

Développement d'un potentiel Machine-Learning sur une base de données existante.

Validation du potentiel par rapport aux données ab initio et expérimentale.

Mise en oeuvre de simulation de Dynamique Moléculaire de grande taille sous diverses sollicitations.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Connaissance de méthodes de Dynamique Moléculaire, Emploi du HPC, Connaissance matériaux.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	DENOUEL Christophe Email : christophe.denoual@cea.fr MAILLET Jean-Bernard Email : jean-bernard.maillet@cea.fr

CONTEXTE : Computational resources have experienced exponential growth in recent decades, enabling the simulation of complex physical problems at the cost of a massive increase in data storage. This is especially true for atomistic simulations, which can now involve billions or even trillions of particles, offering unparalleled capabilities to investigate critical physical phenomena. Nonetheless, these simulations require dramatically large data storage for post-processing purposes. In this context, on-the-fly analysis has gained momentum, yet it remains challenging to implement efficiently without impacting simulation engine performance, particularly when high temporal resolution is needed. Therefore, compressing information before recording is essential.

OBJECTIF : Consequently, tracking microstructural changes in materials under extreme conditions in 4D (time and space) using in-situ analysis in atomistic simulations represents a significant but essential milestone. It provides unmatched insight into dynamic processes at the atomic scale, enabling the observation of real-time transformations and mechanisms that govern material behavior under high temperature and pressure. The temporal resolution gained from tracking helps identify the rates and pathways of microstructural evolution, crucial for understanding material stability and performance.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Specifically, the spatial resolution of atomistic simulations enables the detailed examination of crystal defects such as dislocations, twinning, vacancies, and pores. These defects play critical roles in initiating dynamic phase transformations, melting/solidification processes where grain/phase boundaries are present, or damage. By mapping these changes in four-dimensional space, we gain insight into the statistics of their temporal occurrences and spatial correlations. This approach allows us to establish connections between their evolution and key collective effects in out-of-equilibrium material behavior.

Consequently, this will lead to more accurate predictive models that account for the complexity at the microscopic scale.

In summary, integrating 4D tracking within atomistic simulations represents a potent approach to materials science, providing deeper insights into microstructural dynamics. This method utilizes a parallelism framework to project discrete information onto a 3D Eulerian grid, facilitating on-the-fly clustering. The objective is to extend these capabilities to a 4D context to monitor the temporal evolution of clusters. This extension will enable dynamic graph analysis, allowing not only the tracking of aggregate distributions in volume and shape but also their temporal properties and time clustering behaviors.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Physique statistique, Mécanique, Informatique.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : ExaStamp

DURÉE : 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	DUBOIS Alizée Email : alizee.dubois@cea.fr LAFOURCADE Paul Email :

CONTEXTE : Le sujet porte sur la détermination des constantes élastiques par le calcul ab-initio et la modélisation de leurs dépendances dans le plan (P,T).

OBJECTIF : L'objectif de l'étude est donc de fournir un modèle capable de reproduire au mieux les variations des propriétés élastiques d'un matériau soumis à diverses conditions thermodynamiques (pressions et températures). La détermination des constantes élastiques par le calcul ab initio est un moyen de confronter son modèle à une expérience numérique supposée représenter assez fidèlement le vrai comportement de la matière. Pour certains matériaux posant des questions sanitaires, comme le plomb, de "vraies" expériences sont difficiles à réaliser et le calcul ab initio peut donc se substituer à la donnée expérimentale.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Dans un premier temps, le candidat.e devra se familiariser avec les techniques dites ab-initio de détermination des constantes élastiques. Pour ce faire, il s'agira d'abord de poursuivre une étude qui a été faite dans notre laboratoire et publiée dans le journal "Journal of Physics: Condensed Matter" des constantes élastiques. Cette technique, la plus exacte théoriquement, est très couteuse en temps de calcul si on veut la mener à bout. Aussi, une autre méthode moins couteuse (la méthode TDEP) a été proposée pour déterminer les constantes élastiques en se basant sur une approximation harmonique un peu améliorée. Ces deux méthodes doivent être comparées afin de trouver celle qui offre le meilleur compromis entre la précision des résultats et le temps de calcul. Dans un second temps, une fois la meilleure méthode retenue, il s'agira de l'appliquer pour la détermination des propriétés du béryllium en pression et température.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Connaissance en physique du solide, physique de la matière condensée, dynamique moléculaire, dynamique moléculaire quantique, physique statistique.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Développement en Python, calculs ab initio.

DURÉE : 1 à 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	JAUPART Etienne Email : etienne.jaupart@cea.fr

CONTEXTE : Ce projet vise à combler une lacune majeure des calculs 1ers principes en permettant des simulations fiables des états électroniques excités (méthode GW) via l'approche Projector Augmented-Wave (PAW). Ces avancées seront intégrées dans le logiciel ABINIT, un projet collaboratif international reconnu. L'approximation GW est la référence pour calculer les niveaux d'énergie électroniques dans la matière condensée, corrigeant la sous-estimation du gap par la DFT. La méthode PAW offre précision et flexibilité, largement utilisée pour l'état fondamental et la réponse des matériaux.

Cependant, l'application conjointe GW+PAW pose des difficultés dans certains cas (ex. oxyde de zinc), les raisons étant comprises mais non totalement résolues. Les états de basse énergie sont bien décrits, mais les états de haute énergie restent problématiques. Les pistes envisagées sont : réaliser calculs complets, de négliger certains termes, ou modifier la méthode.

OBJECTIF : L'objectif du projet est de revisiter les théories pour mieux adapter le formalisme PAW à l'approche GW, et de développer un schéma numérique à la fois rapide et précis, clarifiant ainsi la situation actuelle, quelque peu confuse.

Avec la combinaison des formalismes GW et PAW, nous espérons prédire de meilleures propriétés électroniques pour des systèmes solides réalistes : surfaces, jonctions semi-conductrices, etc.

Deux équipes du CEA sont impliquées (DAM Île-de-France et Saclay). Elles sont très actives dans le développement du logiciel ABINIT (www.abinit.org), notamment concernant les approches PAW et GW, ainsi que les développements liés au calcul haute performance. L'accès aux ressources de calcul importantes du CEA sera assuré.

Le sujet proposé permettra d'acquérir de solides compétences en simulation quantique des matériaux. Le.a candidat.e sera intégré.e dans le groupe (international) des développeurs d'un code majeur en simulation atomistique.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Les objectifs du poste de post-doctorat combinent à la fois le développement théorique et la mise en oeuvre : étudier différentes voies pour résoudre les problèmes de fiabilité des calculs GW dans l'approche PAW, implémenter la ou les solutions choisies dans le logiciel ABINIT, et calculer des propriétés électroniques améliorées pour des systèmes solides réalistes.

La collaboration entre le groupe du CEA/DAM Île-de-France et celui de Saclay se fera par des séjours dans les 2 laboratoires, le lieu d'accueil principal étant celui du CEA/DAM Île-de-France.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Doctorat en physique ou chimie des matériaux. Maîtrise de la physique de l'état solide. Maîtrise de la programmation informatique.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	TORRENT Marc Email : marc.torrent@cea.fr BRUNEVAL Fabien Email : fabien.bruneval@cea.fr

CONTEXTE : L'association de matériaux aux propriétés mécaniques contrastées permet d'obtenir au final des pièces dont les propriétés sont au global supérieures à celles des constituants pris séparément. Un exemple classique est celui des matériaux composites à renfort fibreux largement utilisés dans les applications extrêmes. Si l'échelle d'hétérogénéité considérée est variable (microscopique, mésoscopique, voire macroscopique dans le cas des pièces obtenues par fabrication additive), le principe d'associer plusieurs constituants est commun à toutes les échelles. Il s'agit alors d'obtenir les propriétés demandées pour l'application visée.

OBJECTIF : L'objectif de ce post-doctorat est de proposer une méthodologie de modélisation pertinente des propriétés mécaniques non linéaires en statique et en dynamique d'assemblages multimatériaux. Ces assemblages peuvent être réalisés à l'échelle microscopique (par exemple polymère chargé en particules), mésoscopique, et même macroscopique en considérant des pièces obtenues par fabrication additive comme par exemple des structures lattice.

Dans le cas du comportement statique, la modélisation s'appuiera sur des résultats expérimentaux d'essais mécaniques statiques en tomographie X in situ réalisés pendant le post-doctorat. En fonction de l'échelle considérée, ces expériences auront lieu au sein du laboratoire (qui est équipé d'une machine d'essai in situ tomographie X) ou encore pour l'échelle microscopique de campagnes synchrotron à construire par le(la) candidat(e).

Dans le cas du comportement dynamique, le(la) candidat(e) intégrera les résultats d'autres études internes sur le comportement macroscopique de matériaux ou de pièces obtenus par DMA (Dynamic Mechanical Analysis) ou sur machine vibrante (pot vibrant).

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le(la) candidat(e) évoluera dans un laboratoire spécialisés dans les essais instrumentés menés en lien étroit avec la modélisation et la simulation, notamment appliquée aux matériaux multiéchelles.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Mécanique du solide en dynamique, Modélisation, Eléments finis

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Le Ripault BP 16 – 37260 Monts Tél : 02-47-34-40-00 Email : stage.ripault@cea.fr	GUILLET FRANCOIS Email : francois.guillet@cea.fr

CONTEXTE : Afin d'étudier le comportement des matériaux nucléaires sous sollicitations dynamiques, le CEA Valduc souhaite se doter d'un nouveau moyen intégré en boîte à gants dans une installation individuelle. Dans cet objectif, une collaboration avec le CEA de GRAMAT et un industriel spécialiste du domaine a été mise en place. Le choix du moyen retenu fait appel à une nouvelle technologie innovante. Dans un premier temps, différentes nuances d'aciers austénitiques ont été testées en conditions pénalisantes et un prototype a été commandé et réceptionné sur le site de l'industriel. Des collaborations avec les experts académiques des différents domaines seront à mettre en place.

OBJECTIF : Cette étude comporte trois objectifs. Le premier réside dans l'acquisition de nouvelles données expérimentales mécaniques et microstructurales à l'échelle micrométrique à partir des lots d'aciers précédemment exposés, tandis que le second concerne l'analyse microstructurale de la fatigue thermique. Enfin, le troisième et dernier objectif est l'intégration de ces nouvelles données dans un outil numérique de simulation d'évolution microstructurale visant à reproduire l'effet global du vieillissement, en cycle thermique et de pression en couplant par exemple des codes de type CALPHAD et l'utilisation de codes multiphysiques de type COMSOL.

Les travaux se dérouleront suivant trois volets menés en parallèle.

Dans le cadre de ces différentes activités, il sera également demandé au(à la) post-doctorant(e) en charge de cette étude de :

- participer à la mise en place et au suivi de collaborations avec des acteurs reconnus dans les domaines de la fragilisation, de la fatigue thermique et de l'analyse microstructurale,
- synthétiser et publier, dans la mesure du possible, les résultats obtenus sous formes de différents documents et de publications dans des journaux internationaux ou communications en congrès.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : L'unité d'accueil est dédiée à la métallurgie et à la caractérisation des matériaux. Elle dispose de nombreux moyens expérimentaux nucléarisés qui permettront au(à la) candidat(e) d'approfondir ses connaissances sur la caractérisation et le comportement des matériaux métalliques. Enfin, l'intégration du(de la) candidat(e) au sein d'une équipe d'ingénieurs et de techniciens jeunes lui permettra d'enrichir son expérience et d'acquérir les bases pour gérer une équipe dans la suite de sa carrière.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Métallurgie, Fragilisation, Fatigue thermique, Chimie des matériaux, Diffusion, Thermodynamique, Analyse microstructurale, Analyse d'image, Langage python

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : COMSOL, ThermoCalc

DURÉE : 1 an + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	BUY François Email : francois.buy@cea.fr OUDOT Benoit Email : benoit.oudot@cea.fr

CONTEXTE : Le stockage et la mise en œuvre des isotopes de l'hydrogène sont des briques technologiques cruciales au développement de la fusion thermonucléaire dans le réacteur ITER et le futur démonstrateur DEMO. Les procédés permettant de manipuler les isotopes de l'hydrogène, réalisés pour la plupart dans des alliages métalliques (aciers, aluminium...), doivent permettre une manipulation sûre en minimisant les sources potentielles de fuite de tritium, tout en ayant des applications plus générales à l'industrie de l'hydrogène. Le CEA dispose d'atouts majeurs concernant les technologies hydrogène (piles à combustible, stockage, électrolyse) et est acteur de référence de la recherche employant les isotopes de l'hydrogène (deutérium et tritium) pour des applications de fusion.

OBJECTIF : Le post-doctorat vise à étudier la cinétique de perméation des isotopes de l'hydrogène à travers les matériaux de structure. La perméation à travers un matériau métallique fait intervenir plusieurs étapes élémentaires de dissociation de surface puis de transport volumique en phase solide (diffusion).

Le couplage entre phénomènes surfaciques et volumiques entraîne une grande variabilité des résultats dans la littérature mais aussi au sein d'un même approvisionnement lorsque celui-ci n'est pas strictement spécifié. La plupart des phénomènes étant thermiquement activés, un écart de quelques dizaines de °C accélère l'établissement du flux de perméation de plusieurs décades (quelques années à quelques jours).

L'ensemble de ces sources de variabilités nous conduit à étudier plus finement les mécanismes physiques associés au transport du tritium (isotope radioactif de l'hydrogène) au sein de deux matériaux standards que sont l'aluminium AZ5G et l'acier inoxydable 316L. Le lien entre la métallurgie et les mécanismes fins de perméation sera un des enjeux forts de l'étude afin d'étudier les sources de dispersions et obtenir des modèles plus prédictifs.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Après avoir réalisé une revue bibliographique, le(la) post-doctorant(e) devra analyser les résultats obtenus précédemment au laboratoire ainsi que les modélisations associées. En parallèle, il(elle) devra mettre en place un banc de caractérisation de perméation sous tritium au travers des matériaux d'intérêt, le tritium permettant de détecter des flux de perméation avec une sensibilité largement supérieure aux méthodes courantes avec l'hydrogène. Enfin, une fois les mécanismes élémentaires sources de variabilité identifiés, le(la) post-doctorant(e) réalisera l'implémentation de ces modèles physiques au sein du logiciel COMSOL Multiphysics afin de les confronter aux résultats de ses expérimentations et aux modèles phénoménologiques en place.

Ce travail se déroulera en lien avec des partenaires académiques (CNRS, LITEN) et industriels.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Physico-chimie des matériaux, métallurgie, analyse de matériaux de structure (acier, aluminium...), gestion de projet

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : une connaissance des logiciels Labview et COMSOL serait un plus

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	GABORIAU Dorian Email : dorian.gaboriau@cea.fr PARIS Thomas Email : thomas.paris@cea.fr

CONTEXTE : La mise en contact du plutonium avec un gaz oxydant mène à l'émergence de nombreuses espèces d'oxydes telles que : PuO₂, Pu₂O₃ et PuC(O) etc...et laisse les atomes de plutonium sous différents degrés d'oxydation. Ainsi, si la corrosion du plutonium métallique est un sujet abondamment traité dans la littérature, il s'avère que les mécanismes d'adsorption/chimisorption des gaz oxydants mis en jeu au cours du processus d'oxydation sont peu étudiés. Le cérium est un élément qui présente des caractéristiques physico-chimiques similaires à celles du plutonium, et, en particulier, dans le domaine de l'oxydation (apparition de deux oxydes de même structures, cinétiques équivalentes). Etant non radioactif, sa manipulation permet d'accéder à de nombreux dispositifs.

OBJECTIF : L'adsorption-dissociation des gaz O₂ ou H₂O en surface des oxydes de plutonium et des oxydes de cérium seront étudiées afin de mieux appréhender les mécanismes mis en jeu lors du processus d'oxydation. Les techniques d'analyse de surface dédiées à ces études seront basées sur la spectroscopie de photoémission par rayons X et UV. Les surfaces seront exposées au gaz in situ ou en operando.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Des expériences operando seront envisagées sur surfaces de cérium. Le(la) post-doctorant(e) aura donc en charge :

- l'organisation et le suivi des expériences en laboratoire;
- l'analyse des résultats à l'aide des logiciels développés par la communauté scientifique pour le traitement des résultats en diffraction et en XPS ;
- la participation à la mise en place et au suivi de collaborations avec des acteurs reconnus dans le domaine de l'analyse de surface ;
- la synthèse des résultats sous forme de différents documents et de publications dans des journaux internationaux.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Analyse de Surface, spectroscopie de photoémission

DURÉE : 1 an + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	JOLLY Lionel Email : lionel.jolly@cea.fr

CONTEXTE : La compréhension des mécanismes de corrosion des actinides, phénomènes complexes et non intégralement élucidés, constitue un programme important pour l'industrie nucléaire. Ces phénomènes sont fortement dépendants d'un grand nombre de paramètres parfois interdépendants (conditions d'essais, état de surface, homogénéité du matériau, ...). Ainsi, afin de mettre en place, à terme, des études approfondies de ces phénomènes de corrosion, il est nécessaire de mettre en œuvre des échantillons dont l'état de surface est parfaitement maîtrisé et caractérisé.

OBJECTIF : Ainsi, dans le cadre du post-doctorat, l'enjeu sera de comprendre l'influence de l'état de surface d'échantillons en alliage de plutonium concernant leur réactivité vis-à-vis de l'hydrogène (hydruration). Plusieurs paramètres pouvant affecter les mécanismes d'hydruration devront être évalués comme l'épaisseur, la composition et la microstructure de la couche d'oxyde dont la formation dépend de l'atmosphère vue par les échantillons, ainsi que de la présence d'inclusions ou autres défauts surfaciques. Ce sujet a donc pour objectif de contribuer à l'amélioration de la description et de la compréhension des mécanismes dans le processus d'hydruration via la mise en place d'expériences élémentaires qui nécessiteront l'utilisation d'un large panel de moyens de caractérisation (DRX, MEB, XPS, modules de corrosion, microscope numérique, ...) et donc la coordination des équipes de l'unité d'accueil.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Pour atteindre ces objectifs, le(la) post-doctorant(e) devra :

- réaliser une veille bibliographique sur les mécanismes d'hydruration sur plusieurs matériaux métalliques ;
- définir un programme expérimental ;
- coordonner la réalisation des expériences, exploiter et interpréter les résultats avec le REX des équipes spécialisées ;
- synthétiser et proposer des modélisations de cinétique réactionnelle.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Profil du(de la) candidat(e) :

- créativité ;
- autonomie et esprit d'initiative ;
- propension à travailler en équipe ;
- gestion d'un projet de recherche.

DURÉE : 1 à 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	RAVAT Brice Email : brice.ravat@cea.fr WEURLERSSE Katia Email : katia.weurlersse@cea.fr

**MATHÉMATIQUES,
INFORMATION
SCIENTIFIQUE,
LOGICIEL**

CONTEXTE : La simulation par la méthode Monte Carlo est une approche de référence pour les calculs de transport de particules en neutronique. Elle repose sur la génération de trajectoires aléatoires représentant les déplacements des neutrons dans un milieu, permettant d'estimer différentes grandeurs physiques. Cependant, ces simulations peuvent être très rapidement coûteuses en temps de calcul en raison de la complexité de la modélisation et du grand nombre d'événements à simuler. C'est pourquoi, avec l'avènement des architectures GPU, des opportunités émergent pour accélérer ces simulations en exploitant leur capacité à effectuer des calculs massivement parallèles. Deux grandes classes d'algorithmes history-based et event-based sont couramment utilisées. L'implémentation efficace de ces deux paradigmes sur GPU constitue un défi scientifique et technique, notamment du fait des schémas d'accès mémoire divergents et de la nécessité d'un parallélisme fin.

OBJECTIF : Ce post-doctorat a pour objectif la conception, l'implémentation et l'optimisation des algorithmes de transport Monte Carlo sur GPU à l'aide de Kokkos.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Faisant suite à une analyse des travaux traitant de l'accélération sur GPU pour les codes de neutronique Monte Carlo, le ou la post-doctorant(e) aura pour but de développer un prototype intégré à un code C++ existant en utilisant la librairie Kokkos pour paralléliser les tâches et les exécuter sur GPU. Pour cela, il ou elle réalisera les actions suivantes :

1. Conception de structures de données en C++ génériques et spécialisées, capables de supporter une allocation efficace, des accès mémoire optimisés, et une utilisation cohérente sur CPU et GPU en maintenant un code lisible, modulaire et extensible.
2. Implémentation sur GPU des algorithmes de transport Monte Carlo, en veillant à la portabilité et à l'optimisation du code.
3. Intégration transparente (via pybind11) du code C++ avec l'écosystème Python 3 présent dans le code pour le pilotage haut niveau sans compromettre la performance en cœur de calcul.
4. Développement de benchmarks basés sur des cas représentatifs afin d'évaluer l'impact des choix d'implémentation sur GPU sur les résultats en les comparant à ceux obtenus par des méthodes classiques sur CPU et valider l'exactitude des simulations.
5. Analyse comparative approfondie pour les algorithmes de transport Monte Carlo sur les différentes architectures CPU et GPU disponibles. L'objectif est d'identifier les goulots d'étranglement dans l'implémentation initiale en utilisant des outils de profilage et proposer des améliorations pour obtenir une accélération significative par rapport aux implémentations CPU classiques.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Docteur(e) en informatique scientifique, physique computationnelle ou mathématiques appliquées avec une forte compétence en programmation C++ moderne, parallélisme GPU (CUDA/HIP/SYCL). La maîtrise de Kokkos et des outils d'analyse de performance sur GPU est un atout majeur. Une expérience dans la simulation Monte Carlo serait également appréciée.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : C++;Python;pybind11;Git;Kokkos

DURÉE : 1 à 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	FERNEX Frédéric Email : frederic.fernex@cea.fr WALBRON Amaury Email : amaury.walbron@cea.fr

MÉCANIQUE ET THERMIQUE

CONTEXTE : La conception de systèmes performants et toujours plus sûrs nécessite d'imaginer de nouvelles solutions pour amorcer les explosifs qui en constituent la charge. En effet, les explosifs couramment utilisés sont déjà très peu sensibles et il paraît difficile d'espérer dégager des marges supplémentaires dans ce domaine.

L'amorçage multipoints des explosifs, dont le principe est que l'explosif ne détonne que lorsque tous les points d'amorçage sont activés de façon synchrone est une voie possible de gain en sûreté substantiel. Ce concept est décrit dans la littérature, mais très peu de données sont disponibles, qu'elles soient expérimentales ou issues de simulations.

OBJECTIF : L'objectif du contrat post-doctoral sera d'étudier de façon approfondie les mécanismes régissant l'amorçage multipoints. Pour cela, le(la) candidat(e), après une recherche bibliographique exhaustive qui le(la) conduira à appréhender finement le problème de façon théorique, proposera les configurations a priori les plus pertinentes et les testera à la fois expérimentalement et en réalisant des simulations hydrodynamiques avec un code développé au CEA. La compréhension des phénomènes mis en jeu qui résultera de ces travaux est primordiale pour être en mesure de choisir une configuration d'amorçage adaptée à chaque besoin.

Pour la partie expérimentale, le(la) candidat(e) s'appuiera sur le Générateur de Chocs Opto-Pyrotechnique (GCOPY) du laboratoire qui permet de tester de nombreuses configurations d'amorçage optique aérien. Celui-ci est couplé à des diagnostics de pointe tels que la vélocimétrie hétérodyne (VH), des caméras ultrarapides à balayage de fente ou à images intégrales. Il(elle) pourra également utiliser d'autres moyens expérimentaux disponibles au laboratoire si nécessaire ou faire appel à des collaborations extérieures, au CEA/DAM ou en dehors. Des expériences d'imagerie X à contraste de phase pourront par exemple être envisagées à l'ESRF pour étudier la propagation des ondes de chocs.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le déroulement du post-doc sera le suivant :

- 1) Recherche bibliographique exhaustive
- 2) Simulations pour définir les configurations les plus pertinentes
- 3) Validation expérimentale par des essais d'amorçage optique aérien. Mise au point d'un démonstrateur
- 4) Transposition du concept à un système fibré

DURÉE : 2 à 3 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/Le Ripault BP 16 – 37260 Monts Tél : 02-47-34-40-00 Email : stage.ripault@cea.fr	HEBERT Philippe Email : philippe.hebert@cea.fr

CONTEXTE : Les matériaux pour les applications spatiales nécessitent des exigences toujours plus élevées, issues de compromis entre différentes propriétés. Pour répondre aux attentes, le recours à des matériaux composites multi-architecturés allant jusqu'au design d'une micro ou d'une mésostructure spécifique est de plus en plus fréquent. L'apparition des nouvelles techniques tels que la fabrication additive ouvre aux concepteurs de nouvelles libertés de forme, de choix de matériaux, et la possibilité de combiner plusieurs matériaux au sein d'une même pièce. Dans ce contexte, les nécessités de modélisation des propriétés matériaux sont toujours plus importantes et nécessitent de plus en plus des descriptions à différentes échelles et multiphysiques. Les approches de modélisation classiques trouvent cependant des limitations induites par le temps calcul lorsque plusieurs échelles d'observation sont concernées. Le sujet des modèles de substitution est ainsi très actif dans la littérature.

OBJECTIF : Une approche par machine learning pour formuler ces modèles de substitution est actuellement étudiée pour évaluer son efficacité notamment dans sa capacité à prédire et extrapoler des propriétés pour des architectures nouvelles. Les réseaux DMN (deep material network) se différencient des approches de machine learning classiques en introduisant des paramètres entraînables définis physiquement, permettant d'interpréter plus facilement pour l'utilisateur les liens entre la géométrie de la microstructure étudiée et les paramètres du réseau plutôt que d'être de purs paramètres statistiques à optimiser. Ces modèles ont émergé comme des solutions prometteuses pour les problèmes nécessitant des modélisations multi-échelles tant dans leur fiabilité à prédire un comportement mécanique entre différentes échelles que dans leur interprétabilité.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Précédemment, une première implémentation d'une loi de comportement permettant d'injecter à chaque noeud d'une simulation éléments finis l'appel à un réseau de neurones type DMN a été réalisée. Le(la) candidat(e) sera alors en charge de deux objectifs :

- * premièrement, de développer des approches avec notamment l'ajout de comportements micropolaires ou de réseaux variationnels qui sont les tous derniers développements disponibles des DMN.

- * deuxièmement, de construire des outils permettant de générer, prédire et optimiser des microstructures permettant d'atteindre des propriétés cibles. Ce deuxième volet pourra être en parallèle vérifié expérimentalement par la fabrication des microstructures optimisées ainsi que de leur caractérisation mécanique.

- * Si le temps le permet, des explorations sur les problématiques de modélisations multiphysiques (notamment thermique-thermomécanique) rencontrées au laboratoire pourront également être abordées.

Le(la) postdoctorant(e) évoluera dans un laboratoire spécialisé dans les essais instrumentés menés en lien étroit avec la modélisation et la simulation, notamment appliquée aux matériaux composites multi-échelle.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Mécanique du solide, Modélisation, Éléments finis, notions de machine learning

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Python, C/C++

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Le Ripault BP 16 – 37260 Monts Tél : 02-47-34-40-00 Email : stage.ripault@cea.fr	PORTAL Alexandre Email : alexandre.portal@cea.fr

CONTEXTE : La fabrication additive est une technologie de pointe qui offre de nombreux avantages. Elle permet de réduire considérablement les cycles de fabrication en produisant des pièces directement à partir de modèles numériques. Cela permet d'imprimer des formes complexes sans usinage en éliminant les étapes de fabrication traditionnelles qui peuvent être longues et coûteuses et de réaliser des géométries impossibles à obtenir avec des méthodes usuelles. De plus, ce procédé permet de minimiser les masses des pièces en ajustant leur forme et leur structure interne à façon pour répondre aux exigences de performance. L'objectif de cette étude est de mettre en place une démarche robuste permettant de caractériser et identifier le comportement de ces matériaux qui peuvent être fortement hétérogènes de par leur conception (orientation des couches d'impression, gradient de densité, matériaux structurés...).

OBJECTIF : Votre mission consistera à :

- Déterminer les conditions d'essais les plus pertinentes pour caractériser les matériaux étudiés, et adapter si besoin les méthodes d'essais existantes
- Caractériser les matériaux à l'état massif et structuré à l'aide de l'instrumentation et des moyens disponibles (corrélation d'images...)
- Établir le lien entre les propriétés mesurées sur les matériaux massifs à l'aide d'essais élémentaires (traction, flexion, compression...) et ceux des matériaux structurés ou à gradient, puis valider la démarche par calcul analytique et/ou modélisation
- Étudier l'effet des défauts liés au procédé de fabrication sur les propriétés mécaniques des matériaux étudiés (présence de porosités, fragilité des interfaces des couches d'impression, écarts entre la structure théorique et réelle...)
- Déterminer l'erreur commise par des approches classiques de type ingénieur sur la détermination de la contrainte à rupture de ces matériaux à l'aide de modèle(s) analytique(s) et de modèles éléments finis

Vous travaillerez au CEA/Le Ripault dans une unité chargée de caractérisation et serez en lien étroit avec les équipes de fabrication additive et le bureau d'études.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Vous êtes titulaire d'un Bac+8 (Doctorat) en mécanique des matériaux, disposez d'une première expérience en caractérisation des matériaux et possédez de bonnes connaissances en modélisation numérique. Des compétences en programmation (Python, Matlab...) seront un atout supplémentaire.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Modélisation éléments finis (Abaqus), mécanique des matériaux

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Le Ripault BP 16 – 37260 Monts Tél : 02-47-34-40-00 Email : stage.ripault@cea.fr	UGUEN Alexandre Email : alexandre.uguen@cea.fr

PHYSIQUE DE L'ÉTAT CONDENSÉ, CHIMIE ET NANOSCIENCES

CONTEXTE : Les polymères amorphes sont généralement linéaires et peuvent être fondus ou vitreux à température ambiante. Ils sont utiles dans de très nombreuses applications industrielles où ils peuvent être soumis à des chocs. Ces applications recouvrent par exemple les équipements automobiles et aéronautiques, les structures spatiales et les explosifs à liant plastique. Dans ces applications, les polymères sont souvent présents sous forme de composite et peuvent représenter une fraction très variable du matériau allant de 5% à 95% de la masse totale. Par exemple, les élastomères sont utilisés comme liants pour des polycristaux moléculaires énergétiques. Dans ce cadre, leurs propriétés d'accommodation des contraintes lors de sollicitations rapides sont cruciales. Afin de prédire la réponse mécanique du matériau composite, il est nécessaire d'avoir une bonne idée de la réponse du polymère seul.

OBJECTIF : Le comportement mécanique des polymères a une composante viscoélastique. Le but de ce projet est de déterminer si un modèle viscoélastique linéaire fini suffit à reproduire la relaxation de la contrainte suite à un choc.

L'étude des polymères peut être réalisée efficacement à l'aide de simulations atomistiques de dynamique moléculaire (DM) classique. Les propriétés structurales, mécaniques, thermodynamiques du matériau à l'équilibre et hors-équilibre peuvent être obtenues directement par DM.

Enfin, les dernières architectures de supercalculateurs ont considérablement réduit le coût des simulations de DM, ce qui permet de simuler couramment des systèmes de taille réaliste pour les propriétés étudiées, équivalant à plusieurs millions ou dizaines de millions d'atomes. Un code de DM est développé au CEA DAM et est particulièrement adapté à l'étude des propriétés mécaniques. Parallèlement, un code de champ de phase est développé au CEA DAM. Il est idéal pour résoudre des problèmes de mécanique des milieux continus avec transition de phases et peut être adapté à l'étude de matériaux viscoélastiques.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : - Réalisation de simulations de DM de choc direct sur un polymère amorphe afin de déterminer la relaxation de la contrainte à l'arrière du front de choc.

- Réalisation de simulations de DM à l'équilibre sur le même polymère dans différents états choqués pour déterminer les modules viscoélastiques $G(t)$ et $K(t)$, par relation de Green-Kubo.

- Etude analytique de modélisation du comportement d'un matériau viscoélastique sous choc, à l'aide de $G(t)$ et $K(t)$.

- Simulations de champ de phase du modèle précédemment déterminé afin de calculer la relaxation de la contrainte à l'arrière d'un front de choc.

- Comparaison de la relaxation de la contrainte observée par les deux méthodes

A plus long terme, nous envisageons une modélisation du polycristal moléculaire énergétique, dont une loi de comportement existe, et du liant polymère dans un code de calcul par champ de phase.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Doctorat en physique, mécanique ou chimie. Connaissance approfondie d'une des deux techniques de calcul (dynamique moléculaire ou champ de phase), usage fluide de linux, connaissance en physique statistique et/ou mécanique des milieux continus.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Dynamique moléculaire ou champ de phase.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	LEMARCHAND Claire Email : claire.lemarchand@cea.fr DENOVAL Christophe Email : christophe.denoual@cea.fr

PHYSIQUE DU NOYAU, ATOME, MOLÉCULE

CONTEXTE : La méthode « particle-in-cell » (PIC) est désormais la technique la plus commune pour la simulation cinétique des plasmas soumis à d'intenses faisceaux laser ou de particules chargées. Les codes PIC modernes intègrent couramment des modules Monte Carlo décrivant divers processus atomiques, radiatifs ou de d'électrodynamique quantique. Un exemple notable est le code CALDER, développé au CEA au cours des deux dernières décennies. Ces outils pèchent toutefois par l'imprécision notoire de leurs modèles collisionnels dans des plasmas relativement froids et denses. Des corrections ad hoc peuvent être appliquées, cependant, ces corrections sont le plus souvent heuristiques et leur validité restreinte à des plages étroites de paramètres.

OBJECTIF : Le projet vise à améliorer la description des collisions élastiques dans les simulations PIC. Ce nouveau modèle s'appuiera sur les théories du transport développées pour les métaux liquides et les plasmas denses, en tenant compte de la dégénérescence électronique, de l'écrantage électronique et de l'ordonnancement atomique. Plus précisément, nous envisageons d'adapter le formalisme de Ziman généralisé à deux températures au cadre PIC. Une fois incorporé dans CALDER, ce modèle sera appliqué à deux configurations physiques.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Un algorithme collisionnel inspiré d'un module existant sera d'abord développé, intégrant diverses corrections par rapport au modèle précédent. Les éléments théoriques seront tirés de la littérature, et l'algorithme sera validé en reproduisant la résistivité électrique en fonction de la température du plasma.

Par la suite, des simulations CALDER exploreront l'influence de ce nouveau modèle dans deux configurations. La première mettra en jeu des faisceaux d'électrons ultrarelativistes injectés dans des métaux solides, en se concentrant sur les instabilités concurrentes (modes de filamentation et obliques "double-faisceau") et leurs signatures radiatives, en lien avec un projet expérimental au SLAC National Accelerator Laboratory.

La deuxième étude portera sur le chauffage isochore de cibles solides par des impulsions laser ultrabrèves, visant à créer des plasmas de haute densité d'énergie pour tester les modèles de physique atomique. Un traitement raffiné des collisions pourrait significativement modifier la dynamique de chauffage de la cible par rapport aux calculs antérieurs.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Physique des plasmas.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Simulations PIC, programmation, calcul haute-performance.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	GREMILLET Laurent Email : laurent.gremillet@cea.fr

CONTEXTE : Transport properties in the warm dense matter regime are crucial for accurate modelling of planetary physics and inertial confinement fusion. Here at CEA DAM Île-de-France, we develop and maintain state-of-the-art high pulsed power and laser facilities for addressing plasma physics problems related to these research areas. We are also involved in various experiments conducted on large X-ray research facilities (Synchrotron and X-FEL), whose results are compared to ab initio theoretical computations performed on our supercomputers. If you are looking for some of the most skilled and creative teams, working with cutting-edge research technologies, this is the right place to be.

OBJECTIF : We have an opening position for a Postdoctoral Research Staff Member in the field of plasma physics. You will be integrated in a team of experimental physicists conducting high pulsed power and laser driven-shock experiments to understand problems in the edge of warm dense matter. The research seeks to advance transport properties of warm dense metals in the expanded regime, through a combination of on-site experiments at CEA DAM Île-de-France and X-ray absorption experimental campaigns at the European Synchrotron Research Facility. Experimental results will be interpreted using numerical simulations and analysis tools, but also in collaboration with theoretical physicists performing ab initio computations.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT :

- Conducting research in the area of warm dense matter using high pulsed power and laser power facilities.
- Designing new experiments, developing and maintaining electrical and optical diagnostics.
- Interpreting measurements and performing numerical simulations.
- Comparing experimental data and numerical results to provide new interpretations and advanced physics understanding.
- Working as a team member among experimental and theoretical physicists.
- Publishing/presenting your research results in peer reviewed scientific journals and international conferences.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES :

- PhD in plasma physics or related field.
- Demonstrated knowledge of basic plasma physics.
- Experience in electrical and optical measurements devices.
- Documented publication record in peer reviewed literature and experience presenting research results to a large audience.
- Experience in carrying out independent research.
- Proficient verbal and written communication skills necessary to work in a multidisciplinary team environment, author technical and scientific reports and publications, and deliver scientific presentations.
- Experience in working independently and in a team environment to achieve program goals in a timely fashion.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	JODAR Benjamin Email : benjamin.jodar@cea.fr SOLLIER Arnaud Email : arnaud.sollier@cea.fr

CONTEXTE : ESTHER is a 1D Lagrangian code for radiation-matter interaction that studies the evolution of materials transitioning from the solid phase to the plasma phase under the effect of an intense radiation pulse (laser, X-rays, electrons, ions, etc.). It accounts for the hydrodynamic evolution of fluid or solid materials (including mechanical effects), energy deposition of different types, thermal conduction, radiative transfer, and many other phenomena, for one-dimensional plane, axial and spherical geometries.

We aimed to develop new models to extend the ESTHER capabilities to compare with challenging HED experiments. For example, a mixing model development for EOS, transport properties and opacities will be added, and compare with experiments with laser interaction on gas jet or buried layer, or experiments with a high pulse power device. Another study intends to develop non-thermal electrons distribution which is of tremendous importance for UHI experiments.

OBJECTIF : We have an opening position for a Postdoctoral Research Staff Member in the field of plasma physics. You will be integrated in a team of physicists conducting experiment on various installations (laser fs or ns, XFEL, synchrotrons, high pulse power), and developing numerical simulations and analysis tools. In order to develop new models into ESTHER, the candidate will be interacting with experienced scientist in Equation Of State calculations or Particles In-Cell development.

What is expected:

- Developing new models, such as mixing model, or non-thermal electrons distribution.
- Designing and conducting new experiments in order to validate the models.
- Interpreting measurements and performing numerical simulations.
- Comparing experimental data and numerical results to provide new interpretations and advanced physics understanding.
- Working as a team member among experimental and theoretical physicists.
- Publishing/presenting your research results in peer reviewed scientific journals and international conferences.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : - PhD in plasma physics or related field.

- Demonstrated knowledge of basic plasma physics.
- Experience in developing analytical models and software development.
- Documented publication record in peer reviewed literature and experience presenting research results to a large audience.
- Experience in carrying out independent research.
- Proficient verbal and written communication skills necessary to work in a multidisciplinary team environment, author technical and scientific reports and publications, and deliver scientific presentations.
- Experience in working independently and in a team environment to achieve program goals in a timely fashion.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	LECHERBOURG Ludovic Email : ludovic.lecherbourg@cea.fr

CONTEXTE : Une modélisation précise de la conduction thermique électronique est essentielle pour la simulation du chauffage d'un plasma par un laser intense. C'est particulièrement le cas pour les plasmas de fusion thermonucléaire inertielle par laser qui nous intéressent. Cependant, les expressions classiques de ce coefficient de transport dans les plasmas ne sont souvent pas valides et conduisent généralement à surestimer les flux de chaleur et sous-estimer le préchauffage électronique. Afin de progresser significativement dans cette thématique, nous avons entrepris un effort de caractérisation expérimentale des profils de température et de densité électronique, dans différentes conditions plasma, avec et sans champ magnétique imposé. Parallèlement, des efforts importants de modélisation ont été réalisés dans les codes de simulation ainsi que dans l'évaluation des coefficients de transport.

OBJECTIF : Ce contrat postdoctoral a pour objectif principal l'analyse et la modélisation des résultats acquis lors de campagnes expérimentales réalisées sur l'installation laser LULI2000, à l'aide de différents codes de simulation.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Deux types de code sont disponibles. Le premier permet de modéliser toute l'expérience à l'échelle hydrodynamique. Le second type de code est cinétique, résolvant les équations de Fokker-Planck dans certaines approximations. Ces différentes ressources permettront d'obtenir une vue d'ensemble des résultats expérimentaux, une compréhension des différents mécanismes mis en jeu et, finalement, une appréciation de la pertinence des coefficients de transport utilisés. Lors de ces études, une réflexion est attendue sur l'élaboration d'un modèle de transport non local magnétisé. De même, suivant la maturité des modèles étudiés, leur implémentation dans un code sera un atout.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Physique des plasmas

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	LOISEAU Pascal Email : pascal.loiseau@cea.fr MASSON-LABORDE Paul-Edouard Email : paul-edouard.masson-laborde@cea.fr

CONTEXTE : Dans la fusion par confinement inertiel (FCI), une onde de choc bien calibrée est utilisée pour comprimer une capsule remplie d'un gaz deutérium-tritium jusqu'à des densités et températures suffisamment élevées pour déclencher des réactions nucléaires de fusion. L'onde de choc est générée par un ensemble de faisceaux laser focalisés sur une cavité permettant de créer un bain radiatif X. Du fait de ce rayonnement ultra-intense, électrons et noyaux peuvent se retrouver avec des distributions de température très différentes induisant des dynamiques de transition de phases particulières au sein de la cavité. Alors que la FCI a démontré sa faisabilité grâce aux succès du National Ignition Facility (NIF), la microphysique en jeu reste, elle, encore à élucider pour permettre l'optimisation de futures plateformes.

OBJECTIF : Pour caractériser la matière aux conditions extrêmes, les simulations ab initio incluant les effets quantiques électroniques et les effets à N-corps ont permis des avancées significatives, et ce même avec des températures électroniques et nucléaires différentes. Ces calculs sont toutefois extrêmement coûteux en temps de calcul et ne peuvent être utilisés que sur des systèmes de taille très limitée. Pour remédier à ce problème, il est possible de construire des potentiels numériques en apprentissage automatique calibrés sur les simulations ab initio mais pouvant ensuite être utilisés dans des simulations classiques plus longues et avec beaucoup plus de particules. L'objectif de ce projet est d'utiliser cette technique afin de caractériser la microphysique en jeu lors des expériences de FCI.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le.a post-doctorant.e commencera par se familiariser avec les outils de création de potentiels numériques sur des cas simples. Il s'agira ensuite de créer une méthodologie permettant l'inclusion de la température électronique dans le potentiel numérique et d'entraîner ce potentiel sur une base de données suffisamment représentative. Enfin, le potentiel numérique ainsi généré sera utilisé pour réaliser des simulations de dynamique moléculaire classique de taille mésoscopique pour étudier les effets dynamiques dans une cavité et une capsule de FCI.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Une compétence en apprentissage automatique et en physique de la matière condensée est souhaitable.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Python, Linux.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	SOUBIRAN François Email : francois.soubiran@cea.fr

PHYSIQUE THÉORIQUE

CONTEXTE : La description quantique de la matière condensée demande de résoudre le problème à N-corps constitué par les électrons en interaction avec les autres. La résolution exacte est impossible du fait du grand nombre d'électrons. Il est donc nécessaire d'avoir recourt à des approximations. L'une d'entre elles consiste à ne décrire exactement que les interactions entre électrons qui sont importantes. C'est notamment le cas des systèmes (tels que le Fer) dans lesquels les électrons d sont dans des orbitales très localisées spatialement. Dans ce cas, la méthode de champ moyen dynamique (DMFT) offre une bonne description en décrivant exactement les interactions électroniques au sein d'un atome dans le champ moyen des autres. Ce problème d'un atome dans un champ moyen est appelé modèle d'Anderson et constitue en lui-même un problème à N-corps. Des algorithmes quantiques existent pour résoudre ce problème sur un ordinateur quantique.

OBJECTIF : L'objectif du post-doctorat sera de programmer les algorithmes quantiques pour résoudre le problème à N-corps de la DMFT. On commencera par tester la faisabilité, tout d'abord, sur un émulateur ; puis, dans un second temps, sur un ordinateur (simulateur) quantique. Pour cela, il sera nécessaire de reformuler le problème de manière à le rendre compatible avec le type de technologie quantique utilisée. Au CEA DAM, nous disposons de deux simulateurs quantiques de technologies différentes, l'un utilisant des atomes froids, l'autre des photons. Le problème à résoudre sera donc formulé différemment sur chacun d'eux.

Le.a candidat.e aura accès à ces technologies, ainsi qu'à un environnement de programmation adapté. Il.elle pourra participer à des formations au codage d'algorithme quantique, ainsi qu'à l'environnement de programmation qaptiva (eviden) ou autre.

Le code produit sur accélérateur quantique pourrait être couplé au logiciel ABINIT, un logiciel de calcul des propriétés microscopiques des matériaux développé dans le cadre d'un projet international collaboratif à haute visibilité.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le plan de travail pourrait être le suivant :

- Utiliser un algorithme classique de référence, par exemple la méthode du Monte Carlo Quantique, disponible en DMFT dans ABINIT.
- Modéliser un cas d'usage pour le calcul quantique : le modèle d'Anderson pour le Fer.
- Coder l'algorithme quantique, en l'orientant ordinateur quantique digital (VQE ou FCI QMC).
- Réaliser un benchmark algorithme classique/quantique : comparer le résultat du modèle d'Anderson en classique et en quantique.
- Estimer les ressources nécessaires pour le passage à l'échelle.

Le.a candidat.e sera intégré.e dans le groupe de simulation quantique des matériaux au CEA/DAM Île-de-France.

Le projet se fera en collaboration étroite avec le laboratoire "Quantum Lab" de Eviden, qui apportera une expertise précise sur les technologies de programmation des ordinateurs quantiques.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	AMADON Bernard Email : bernard.amadon@cea.fr TORRENT Marc Email : marc.torrent@cea.fr

CONTEXTE : The advent of femtosecond lasers has shed new light on non-equilibrium physics. The rapid energy absorption by electrons and their subsequent energy transfer to the lattice results in non-equilibrium states of matter, initiating a new class of non-thermal processes from ambient solids to extreme conditions of temperature and pressure. The dynamic interplay between electrons and the atomic structure is the central issue driving ultrafast phase transitions. However, the time scale of phase transitions and the microscopic mechanism driving melting are still not well understood. Classical molecular dynamics is well-suited to address this question, but classical potentials are limited in their ability to describe phenomena induced by electronic structure. DFT-based molecular dynamics could overcome this limitation, but it cannot reach the number of atoms necessary to provide a realistic picture. Machine learning potentials fitted on DFT simulations can bridge this gap.

OBJECTIF : Since a decade Machine Learning Interatomic Potential (MLIP) has proven unprecedented capacities in reproducing DFT reference data for very diverse configurations. These potentials rely on defining atomic descriptor that encode the local geometrical environment and then learn the relation between the descriptor and the reference DFT data (energy or atomic forces). This function could be as simple as a linear function or as complex as a multilayer perceptron. As the interaction potential between atoms depend on their electronic temperature we propose to learn and incorporate this dependance directly into the MLIP. Then, the Two-Temperature Model, where the diffusion equation for the electronic temperature is solved on a grid and the ionic motion is solved using MD will be employed to investigate out-of-equilibrium effects on the melting dynamics. In particular large scale MD will be used to simulate the melting of a full gold target (few tens of nm length) under laser absorption.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : The first task for the candidate will be to locate or adapt existing machine learning potentials in the literature to accurately describe metals at high electronic temperatures. This potential will then be fitted on DFT-based simulations and used on simple systems. Then, large-scale molecular dynamics simulations will be conducted on HPC using the molecular dynamics code ExaSTAMP to investigate the time history of a metallic foil illuminated by a femtosecond laser. Throughout the post-doctoral position, the candidate will work in close collaboration with experimental physicists.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : The ideal candidate will have a robust background in either condensed matter physics or plasma physics. Additionally, experience with molecular dynamics simulation is highly desirable. Good skill in programming languages such as C++ and Python is also required.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : DFT based MD code Abinit, Classical MD code ExaStamp.

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	RECOULES Vanina Email : vanina.recoules@cea.fr

SCIENCE DE LA TERRE ET DE L'ENVIRONNEMENT

Estimation de la déformation de la couronne Nord de l'atoll de Moruroa



CONTEXTE : La zone Nord de l'atoll de Moruroa présente une instabilité gravitaire bien documentée. Son évolution géomécanique est télésurveillée en continu conformément aux recommandations de l'International Geomechanical Commission (Bouchez et al., 1997 ; Fairhurst et al., 1999 ; Bilan géomécanique, 2023).

Les déplacements de surface sont documentés en continu par 10 stations GPS qui participent à la mesure du champ de déplacement horizontal. Des mesures topographiques d'un réseau de points de référence et le levé cartographique des fractures s'ajoutent aux données de surface disponibles. Celles-ci sont complétées par la mesure de déformation en profondeur, par extensométrie et inclinométrie.

De l'ordre de plusieurs mm/an au cours des années 1990, les déplacements mesurés se sont réduits au cours du temps. Ils sont actuellement voisins du mm/an et en limite de résolution des systèmes de suivi installés.

OBJECTIF : L'objectif de ce post-doctorat est, dans un premier temps, de mettre dans un même référentiel toutes les observations de la déformation récente de la couronne Nord de Moruroa et de les évaluer. Une analyse des séries temporelles GNSS disponibles sera notamment menée pour optimiser leur interprétation. Des couvertures d'imageries optiques et radar de la zone d'intérêt pourront également être intégrées à l'étude.

La deuxième partie de ce post-doctorat sera consacrée à l'interprétation des données. Celles-ci seront confrontées à des modèles analytiques simples afin de consolider la compréhension des déformations observées. Cette approche permettra d'examiner les processus en jeu au sein du massif corallien, notamment au regard des instabilités gravitaires potentielles.

Les mesures de suivi de la déformation sont ouvertes et le travail pourra être publié dans des journaux à comité de lecture.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : géophysique, Compétences GNSS souhaitées

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : programmation Python ou Matlab

DURÉE : 1 à 2 ans

SCIENCE DE LA TERRE ET DE L'ENVIRONNEMENT

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	BOLLINGER Laurent Email : laurent.bollinger@cea.fr LOEVENBRUCK Anne Email : anne.loevenbruck@cea.fr

Simulation d'effondrements de terrain et des vagues associées par un code 3D



CONTEXTE : Jusqu'à présent, les tsunamis générés par des effondrements de terrain sous-marins étaient modélisés au CEA par un code d'ondes longues 2D (Avalanche) adapté alors aux moyens de calcul mais qui, aujourd'hui, semble obsolète dans la littérature. Le post-doctorat d'Aurélie Louis-Napoléon (2023-2025) a montré que l'outil 3D OpenFoam permettait de simuler avec précision un effondrement de terrain et les vagues associées dans la zone de génération. Au cours de ce post-doctorat, un couplage entre le code 3D et le code CEA de propagation "2D" (Taitoko) a été mis au point de façon à propager les vagues à longue distance.

OBJECTIF : Les travaux effectués par la post-doctorante seront poursuivis. La première tâche sera de se familiariser avec les outils mis au point et de publier le travail effectué sur l'effondrement de 80 Mm3 qui s'est produit en 1979 à Mururoa. L'objectif principal est ensuite de réaliser des simulations d'effondrements potentiels en zone Nord, sachant que la principale difficulté est de définir la géométrie de ces effondrements potentiels. La propagation des vagues sur de longues distances sera simulée par le code tsunami "2D" (Taitoko) couplé au code OpenFoam.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Les simulations seront effectuées sur les machines du CEA. Les effondrements potentiels en zone Nord seront définis à partir des travaux réalisés à l'Ifremer en 2025-2026. Pour ces effondrements, le(la) post-doctorant(e) aura pour tâche d'optimiser le maillage "volumes finis" qui doit épouser la bathymétrie et décrire avec précision l'effondrement et la surface de l'eau. Le(la) post-doctorant(e) vérifiera que les vagues générées sont peu sensibles à la rhéologie du glissement ou à l'interpénétration de l'effondrement et de l'eau. Le travail sur le code 3D sera réalisé en collaboration avec Stéphane Abadie, professeur à l'UPPA (Université de Pau et des pays de l'Adour). La propagation des vagues à longue distance vers les atolls voisins sera simulée avec le code CEA (Taitoko) en utilisant les bathymétries les plus précises disponibles en 2025-2026.

DURÉE : 1 à 2 ans

SCIENCE DE LA TERRE ET DE L'ENVIRONNEMENT

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	HEINRICH Philippe Email : philippe.heinrich@cea.fr

CONTEXTE : Dans le cadre de la surveillance environnementale de sites industriels, et plus spécifiquement dans le cas de marquage anthropique localisé, il importe de connaître précisément les gradients et orientations des sens d'écoulement de la nappe phréatique, qui est la première à pouvoir être impactée, ainsi que leur évolution en fonction des conditions hydrologiques.

Le sujet porte sur l'application de méthodes géophysiques (ERT, PS, IP) pour cartographier finement la piézométrie d'un site CEA (Aquitaine) et caractériser des nappes perchées sur un second site CEA (Touraine).

Des premières expérimentations réalisées en 2025 ont montré l'intérêt de ces méthodes pour les contextes étudiés avec des résultats probants notamment avec l'ERT. Cependant, la méthode de PS n'a pas donné de résultats satisfaisants du fait d'une ZNS peu humide.

Le projet est réalisé dans le cadre du LRC Yves Rocard, partenariat CEA/DAM-ENS Paris.

OBJECTIF : Le projet est la suite directe des deux stages réalisés en 2025 et a pour objectif d'étudier si :

- L'ERT, réalisée à différentes périodes hydrologiques (4 périodes dans l'année), permet d'observer et de suivre les variations de la profondeur du toit de la nappe et de son gradient d'écoulement.

- La méthode PS peut s'appliquer à la cartographie piézométrique dans des conditions d'humidité suffisante, notamment dans le contexte des sables des Landes.

Pour répondre à ces questionnements, il est envisagé de procéder à des investigations en laboratoire puis à l'échelle du terrain :

- Méthode de l'ERT : en laboratoire, les colonnes verticales permettront de caractériser la résistivité électrique des sables pour différentes teneurs en eau. Ces données seront ensuite utilisées lors des inversions des profils ERT acquis à l'échelle du terrain. Plusieurs profils ERT seront réalisés à différentes périodes de l'année (avril, juillet, octobre, janvier) pour respecter les différentes configurations hydrologiques. L'évolution des profils ERT devrait permettre de connaître l'évolution du gradient piézométrique.

- Méthode PS : en laboratoire, l'objectif est d'estimer et de caractériser la résistance de prise en fonction de la teneur en eau du milieu et en fonction de la distance. Ceci permettra de déterminer la teneur en eau minimale de la ZNS en-dessous de laquelle la méthode de mesure de PS sur le terrain serait inopérante. Dans un second temps, cela permettra de caractériser le coefficient de couplage entre la vitesse d'écoulement et la différence de potentiel, qu'il est nécessaire de connaître pour interpréter les mesures sur le terrain. Ce travail sera réalisé via des colonnes verticales de sables des Landes.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le post-dorant sera basé au CEA/DAM de Bruyères-le-Châtel avec des déplacements ponctuels à l'ENS Paris.

Le travail en laboratoire sera réalisé dans les locaux du CEA/DAM et les campagnes de terrain seront effectives sur les sites de Touraine et d'Aquitaine.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Une connaissance du fonctionnement du Syscal Terra Switch serait appréciée.

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : ResiPY, Res2DInv, pyGimli

DURÉE : 1 à 2 ans

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	SCHAPER Lionel Email : lionel.schaper@cea.fr AMESTOY Julien Email : julien.amestoy@cea.fr

CONTEXTE : Le Centre national de données (CND) a pour mission de détecter, localiser et caractériser des événements sismiques, hydroacoustiques et infrasons d'origines variées dans le cadre de ses activités de surveillance des essais nucléaires et des tremblements de terre pour le compte des autorités nationales. La caractérisation de la source sismique permet in fine de définir la nature de l'évènement (tremblement de terre, explosion ou effondrement), sa taille (magnitude), et son origine (naturelle ou anthropique). Ce postdoc a pour objectif d'étudier l'apport de modèles de Terre 3D dans les inversions des formes d'ondes sismiques et de développer une méthodologie à visée opérationnelle pour le CND.

OBJECTIF : Les données sismiques enregistrées à distance régionale (<2000 km) sont utilisées au CND pour apporter des réponses sur la nature des sources sismiques (magnitude, mécanisme et profondeur). Elles sont communément utilisées lors d'inversions du tenseur des moments qui donnent une représentation simplifiée de l'ensemble des forces en jeu à la source. Pour une approche opérationnelle, des modèles de Terre 1D sont exploités pour modéliser les signaux observés. Néanmoins, ils ne sont pas suffisamment représentatifs des milieux traversés par les ondes. Il en résulte de possibles erreurs dans les études de source d'évènements d'intérêt pour le CND.

Pendant le postdoc, le(la) candidat(e) aura pour mission de proposer une procédure opérationnelle pour la génération et la prise en compte de modèles de Terre 3D dans les inversions de source du CND. Il(elle) sera amené(e) à prendre en main un code de calcul de signaux synthétiques basé sur la méthode des éléments spectraux. Il(elle) développera des outils de manipulation de signaux synthétiques issus de modèles de Terre 3D incluant la topographie et démontrera l'apport de tels modèles dans la quantification de la source. Une recherche d'homogénéisation des modèles pourra être menée pour accélérer les calculs. Enfin, le(la) post-doctorant(e) sera amené(e) à étudier plusieurs événements de natures différentes. Ce travail répondra en effet à la volonté du CND de prendre en compte de tels modèles 3D dans les traitements automatiques en temps quasi-réels. Une opportunité de collaboration avec des chercheurs étrangers sera, de plus, étudiée pour une confrontation des méthodes et algorithmes de calculs. Enfin, selon l'avancée des travaux, une réflexion sur la reconstitution de la fonction source temporelle pourra être menée, en sus de la contrainte sur le mécanisme au foyer.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Le postdoc se déroulera au Centre national des données (CND) et sera encadré par les équipes de sismologie opérationnelle et de simulation.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Connaissances approfondies en géophysique, et en particulier en sismologie, connaissances approfondies en traitement du signal

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : Matlab, Python,

DURÉE : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/DAM Île-de-France Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon Tél : 01-69-26-40-00 Email : stage.dif@cea.fr	TRILLA Aurélie Email : aurelie.trilla@cea.fr BURGOS Gaël Email : gael.burgos@cea.fr

SCIENCES POUR L'INGÉNIEUR

CONTEXTE : L'étude et la mise en œuvre de métaux à fort caractère réducteur nécessitent l'emploi de contenants les plus inertes possibles chimiquement. Des matériaux céramiques sont généralement employés dans ce cas, souvent de type oxydes, sous forme de liner ou de revêtement. Lorsque les sollicitations mécaniques de ces matériaux deviennent trop importantes, ils sont souvent complétés par une enveloppe métallique garantissant l'intégrité mécanique de l'ensemble, généralement sous forme de creuset. L'étude de systèmes réels montre que cette inertie chimique n'est que toute relative et s'estompe avec la température. La durabilité de l'ensemble creuset métallique / liner céramique / métal liquide relève alors des cinétiques de réactions aux différentes interfaces. Il est alors nécessaire de quantifier ces cinétiques réactionnelles pour être capable d'estimer la durée de vie de l'ensemble.

OBJECTIF : Objectif général : Identifier le couple métal/céramique présentant la meilleure durabilité en présence d'actinides liquides jusqu'à 1800 °C.

Objectifs détaillés :

1. Etude et optimisation thermodynamique, via la méthode CALPHAD, des systèmes d'intérêts afin de constituer une base de données thermodynamiques dédiée ;
2. Elaborer les échantillons céramiques des systèmes d'intérêt ;
3. Déterminer les cinétiques réactionnelles creuset / liner des systèmes d'intérêt ;
4. Déterminer les cinétiques réactionnelles liner / actinides liquides ;
5. Mettre en place et piloter la réalisation des pièces consommables de géométries complexes.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : La première étape de ce projet concernera l'étude thermodynamique des systèmes d'intérêt, impliquant la construction d'une base de données thermodynamiques dédiée via la méthode CALPHAD. L'élaboration d'échantillons de céramiques appartenant aux systèmes d'intérêt sera réalisée en parallèle. Ils seront utilisés dans une deuxième étape dédiée à l'étude de réactivité des matériaux céramiques retenus avec un métal réfractaire d'une part et d'actinides liquides d'autre part. Des essais d'interaction seront pour cela réalisés, via des traitements thermiques adaptés (températures et durées de maintien), afin de déterminer les cinétiques réactionnelles des différents couples métal/céramique.

Enfin, sur la base des cinétiques réactionnelles, le matériau céramique présentant les meilleures performances en termes de durabilité chimique sera retenu pour la réalisation de pièces consommables de géométries complexes. Ces pièces devront être élaborées via le procédé le plus adapté permettant de garantir les géométries et tolérances associées.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Chimie des matériaux, Réactivité, Cinétique, Diffusion, Microstructure, Thermodynamique

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : CALPHAD, ThermoCalc

DURÉE : 1 an + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	CISZAK Clément Email : clement.ciszak@cea.fr OUDOT Benoit Email : benoit.oudot@cea.fr

CONTEXTE : Le plutonium, tout comme ses alliages, présente une métallurgie relativement complexe. La prédiction du comportement métallurgique de ces matériaux requiert de connaître finement certains paramètres physico-chimiques, tels que les coefficients de diffusion des espèces. La quantité de données disponibles pour ces paramètres étant toutefois assez limitée, il est nécessaire de les compléter par de nouvelles mesures expérimentales. Les résultats de ces nouvelles mesures seront exploités pour le développement d'un outil numérique de simulation de l'évolution microstructurale de ces matériaux en température.

OBJECTIF : Cette étude comporte trois objectifs. Le premier réside dans l'acquisition de nouvelles données expérimentales de diffusion, tandis que le second concerne l'analyse microstructurale d'alliages en fonction de leurs conditions d'élaboration. Enfin, le troisième et dernier objectif est l'intégration de ces nouvelles données dans un outil numérique de simulation d'évolution microstructurale.

Dans le cadre de ces différentes activités, il sera également demandé au post-doctorant en charge de cette étude de :

- participer à la mise en place et au suivi de collaborations avec des acteurs reconnus dans les domaines CALPHAD, diffusion, transformation de phase et analyse microstructurale,
- synthétiser et publier, dans la mesure du possible, les résultats obtenus sous formes de différents documents et de publications dans des journaux internationaux ou communications en congrès.

DÉROULEMENT DU POST-DOCTORAT : Les travaux se dérouleront suivant trois volets menés en parallèles.

L'acquisition de nouvelles données expérimentales de diffusion passera par la mise en place, la réalisation et l'exploitation d'essais d'interdiffusion. Dans le même temps, des analyses microstructurales seront réalisées sur différents alliages présentant des conditions d'élaborations variées. Enfin, ces nouvelles données expérimentales seront intégrées à l'outil numérique de simulation d'évolution microstructurale en température en cours de développement sous le logiciel COMSOL.

L'unité d'accueil est dédiée à la métallurgie et à la caractérisation des matériaux. Elle dispose de nombreux moyens expérimentaux nucléarisés qui permettront au(à) candidat(e) d'approfondir ses connaissances sur la caractérisation et le comportement des matériaux métalliques. Enfin, l'intégration du(de la) candidat(e) au sein d'une équipe d'ingénieurs et de techniciens jeunes lui permettra d'enrichir son expérience et d'acquérir les bases pour gérer une équipe dans la suite de sa carrière.

COMPÉTENCES SOUHAITÉES : Métallurgie, Diffusion, Microstructure, Analyse d'image, Langage python, Thermodynamique, Chimie des matériaux

MÉTHODES ET LOGICIELS SPÉCIFIQUES : COMSOL, ThermoCalc

DURÉE : 1 an + 2 x 1an renouvelables

CENTRE	CONTACT
CEA/Valduc 21120 Is-sur-Tille Tél : 03-80-23-40-00 Email : stage.valduc@cea.fr	CISZAK Clément Email : clement.ciszak@cea.fr OUDOT Benoit Email : benoit.oudot@cea.fr

