

L'Université de Limoges recrute un.e

Post-doctorant MLIP

Catégorie A – Contractuel.le

Réf : 2024-1680008

Présentation de l'Université de Limoges

Créée en 1968, l'Université de Limoges est une université de proximité à taille humaine qui forme plus de 16.000 étudiants et emploie plus de 1 800 agents permanents.

Au cœur de l'Europe, c'est un important pôle d'enseignement supérieur pluridisciplinaire, dans un environnement des plus propices à l'épanouissement scientifique. Ouverte, elle est un lieu foisonnant d'interactions, avec une population étudiante multiple, des structures d'accueil efficaces, des équipes proches, des formations fondées sur des recherches de très haut niveau et pour des débouchés bien identifiés. Son excellence scientifique, avec des laboratoires de pointe et des partenariats de grande envergure, contribue à inventer le monde de demain.

Description de l'institut et de l'unité de recherche

L'IRCER se structure autour de points forts qui constituent son cœur de métier et contribuent à la visibilité du laboratoire. La pluridisciplinarité entre la science des matériaux et l'ingénierie des procédés, ainsi que la combinaison d'approches fondamentales et appliquées, visent à comprendre, caractériser, maîtriser, modéliser les différents processus qui conduisent à l'obtention d'un objet ou d'un dépôt présentant une ou plusieurs propriétés en vue d'un usage donné. Au-delà de la capacité de l'IRCER à innover, la valorisation des résultats auprès du monde socio-économique est également inscrite dans ses gènes.

L'approche pluridisciplinaire réunit, dans quatre axes de recherche complémentaires, des équipes constituées de chercheurs et enseignants-chercheurs issus de divers horizons scientifiques (chimie, physique, mécanique).

Le développement de céramiques innovantes signifie contrôler les arrangements des entités depuis l'atome jusqu'à l'objet pour générer des propriétés nouvelles ou améliorées, qu'il s'agisse de matériaux cristallins ou amorphes. La caractérisation de ces arrangements nécessite d'avoir recours à des outils analytiques de très haute résolution. Ces outils sont, pour la plupart, combinés à des simulations numériques et à la synthèse de (nano)matériaux modèles afin de mieux appréhender les relations structure/ propriétés.

Le développement de procédés innovants, objectif affiché de l'IRCER, s'appuie sur la compréhension des mécanismes fondamentaux de la mise en forme de matériaux massifs ou de couches et de leur consolidation, dans le but d'atteindre des propriétés améliorées ou des fonctions spécifiques. Le panel de procédés étudiés et potentiellement hybridés est très large : procédés physiques de dépôt par plasmas et/ou lasers, voie sol-gel, impression numérique 2D/3D, procédés de frittage non conventionnels, etc.

La logique « matériau + procédé => produit » induit, dans le domaine des matériaux de structure comme dans celui des matériaux fonctionnels, de nombreuses collaborations avec les acteurs industriels concernés par la production de pièces ou de composants, ou encore avec les concepteurs impliqués dans les technologies

utilisatrices de ces matériaux (énergie, technologies de l'information et de la communication (TIC), santé, mécanique, transports, transformation des matières premières...).

Localisation du poste

Institut de Recherche sur les Céramiques (IRCER)
Centre Européen de la Céramique
12 Rue Atlantis,
87068 Limoges, France

Contexte

Description du projet

De nouveaux développements dans les techniques de synthèse ont conduit à la réalisation d'une nouvelle famille de **matériaux à haute entropie** constitués de cinq espèces chimiques diverses ou plus. Grâce à leur contribution intrinsèque à l'entropie élevée par rapport au gain d'énergie interne, leur réalisation est possible. Cela donne lieu à des propriétés inhabituelles intéressantes avec des applications potentielles dans l'électronique, l'énergie verte, etc. [1,2].

Au stade actuel, l'exploration et la compréhension systématiques de cette nouvelle famille de matériaux à haute entropie sont limitées par le vaste espace de phase (arrangement atomique) et l'espace chimique (choix des éléments) qui leur sont inhérents. Le nombre astronomique de possibilités qui en résulte rend l'exploration expérimentale par force brute pratiquement impossible. Compte tenu de la taille des systèmes nécessaires pour les modéliser à partir des premiers principes, une exploration approfondie est infaisable. Par conséquent, l'exploration informatique a été limitée à l'utilisation de facteurs physiques empiriques pour identifier des candidats plausibles avec quelques études de cas sélectives.

Les potentiels interatomiques appris par la machine (MLIP) sont apparus comme un outil puissant pour l'exploration accélérée des matériaux à grande échelle, ce qui est souvent difficile à réaliser avec les méthodologies de premier principe basées sur la mécanique quantique. Des MLIP de bonne qualité peuvent être formés sur la base d'un ensemble minimal de données ab-initio pour l'exploration à grande échelle des énergies internes et des diverses propriétés des matériaux [3].

Les candidats intéressés peuvent contacter l'un ou l'autre des personnels pour une demande de renseignements informelle :

Dr. Santanu Saha : highentropy.materials@gmail.com
Dr. Assil Bouzid : assil.bouzid@cnr.fr

[1] "High Entropy Alloys : A Critical Review", M.H. Tsai et. al., Mater. Res. Lett. 2, 107-123 (2014)

[2] "High Entropy Ceramics", C. Oses et. al, Nat. Rev. Mater. 5, 295-309 (2020)

[3] "Universal interatomic potential for perovskite oxides", J. Wu et. Al., Phys. Rev. B 108, L180104 (2023)

Missions

Missions principales.

L'objectif principal du poste postdoctoral sera la mise en œuvre d'un cadre informatique pour (i) générer des données ab-initio, (ii) ajuster les MLIP et (iii) les comparer à différents systèmes. Ce travail sera effectué en retour afin d'obtenir des MLIP capables d'explorer diverses compositions à haute entropie. En outre, les données résultant de l'exploration des MLIP seront analysées de manière critique pour comprendre les tendances émergentes des systèmes de matériaux.

Contraintes et spécificités du poste.

Nous recherchons un chercheur postdoctoral motivé, titulaire (ou qui le sera bientôt) d'un doctorat et possédant une expérience pertinente dans la simulation des premiers principes et le développement/l'application de potentiels appris par la machine sur divers systèmes de matière condensée pour différentes applications. Le candidat doit avoir une bonne expérience pratique de la programmation ainsi qu'une bonne compréhension de la physique de la matière condensée.

Date limite d'inscription : 8 Octobre 2024

Date de début : Janvier 2025 (non négociable)

Durée : 1 an

Salaire : 2271-3150€ / mois (brut en fonction de l'expérience) Institut : Axe 3 - Organisation structurale multi-échelle des matériaux

Institut de Recherche sur les Céramiques (CNRS), Université de Limoges Limoges 87068, France

Profil requis, compétences

Savoirs Faire et Etre:

(i) Doctorat obtenu ou en passe de l'être d'ici à décembre 2024.

(ii) Expérience de la simulation de principes premiers, de la génération de données et du développement/de l'utilisation de potentiels appris par la machine pour les systèmes de matière condensée.

(iii) Expérience de la programmation en Python et/ou Fortran/C/C++.

(iv) Bonne connaissance de la matière condensée, de la thermodynamique, de la physique/chimie des matériaux, de l'apprentissage automatique.

(v) Bonnes aptitudes à la rédaction et à la communication en anglais

(vi) Motivation personnelle, indépendance et esprit d'équipe

Nature du contrat	Contrat à durée déterminée 12 mois
Date de prise de fonctions	01^{er} janvier 2025
Candidature	CV + lettre de motivation à transmettre uniquement par mail en rappelant la référence de l'offre au plus tard le 08/10/2024 à : Monsieur Michel SENIMON DGSA – DRH Courriel : drh-recrutement-recherche@unilim.fr
Quotité de travail	100%