



**Sujet : Réalisation d'un dispositif de pulsation sur un accélérateur électrostatique /
Implementation of a pulsing device on an electrostatic accelerator**

Contexte : Le laboratoire possède un accélérateur électrostatique de 4 MV permettant de produire des faisceaux de protons, deutons et hélium. Ce dernier est doté d'un dispositif permettant de pulser le faisceau utilisé notamment dans les expériences de physique par temps de vol. Ce dispositif a été rénové en 2019 mais présente des faiblesses liées à l'environnement dans lequel il est installé. En effet, il est installé à l'intérieur de l'accélérateur, sous une pression de SF₆, dans lesquels il y a des claquages électromagnétiques liées aux hautes tensions en jeu dans l'accélérateur (tension maximale de 4 MV). Il est donc nécessaire de déterminer les points de fragilité, de proposer des solutions alternatives et pour finir de proposer des solutions pour améliorer le dispositif en place.

Objectif : Analyser les cartes électroniques abîmées pour diagnostiquer les composants présentant des fragilités. Proposer des solutions alternatives en lien avec la société ayant conçu le dispositif.
Mener des tests hors accélérateur et avec accélérateur pour vérifier le fonctionnement.
Une fois que le dispositif initial aura été rendu robuste, améliorer ce dernier en proposant des fonctionnalités supplémentaires comme une période de pulsation variable.

Déroulement : Le déroulement de cette thématique est prévu sur 2 années (2 x 1 an renouvelable).
Première année : Prise en charge de l'étude du dispositif actuel pour en cibler ses fragilités plus particulièrement lorsqu'il est monté sur l'accélérateur.
Il s'agira de déterminer en particulier, si les faiblesses sont intrinsèques aux cartes électroniques actuelles et/ou induites par l'environnement électromagnétique de l'accélérateur lorsqu'il est en fonctionnement. Des cartes spécifiques pour caractériser in situ l'environnement accélérateur pourront être conçues en lien avec la société ayant conçu le dispositif original. Ces conclusions amèneront des évolutions sensibles aux premières versions de cartes électroniques en terme de blindage électromagnétique.
Deuxième année : Proposition et mise en oeuvre des expériences hors et avec accélérateur nécessaires à l'amélioration du dispositif. il s'agira de confirmer que le dispositif initial aura été rendu robuste puis d'améliorer ce dernier en proposant des fonctionnalités supplémentaires. En particulier, la possibilité de période variable, de durée de pulsation ajustable voire même d'introduire une fonction veto pour bloquer le faisceau en fonction de l'expérience réalisée.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 09/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : -

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

LANTUEJOUL Isabelle

isabelle.lantuejoul@cea.fr



**Sujet : Étude des effet de températures et de pressions pour les transitions de phases /
Study of temperature and pressure effects on phase transitions.**

Contexte : Les mécanismes élémentaires des transitions de phases dans les métaux sont mal connus. Les calculs ab initio permettent d'évaluer les barrières énergétiques associées à certaines de ces transitions à 0 K. Des travaux récents menés au laboratoire sur le cuivre ont ainsi montré, une augmentation marquée de la barrière d'énergie de faute d'empilement avec la pression, en particulier au-delà de 100 GPa, expliquant la métastabilité de la phase 9R et le mécanisme séquentiel de transformation 9R vers CFC régie par le glissement successif de dislocations partielles de Shockley. Cependant, ces calculs ne rendent pas compte des effets de température, qui peuvent modifier significativement la hauteur de ces barrières via les contributions entropiques vibrationnelles, ni de la pleine cohérence thermodynamique.

Objectif : La méthode Projected Average Force Integration (PAFI, Swinburne et al.), permet de calculer des barrières d'énergie libre le long d'un chemin de réaction par intégration thermodynamique. Bien qu'efficace, cette méthode est numériquement coûteuse. Pour surmonter cette limitation, les potentiels interatomiques machine learning (MLIP) offrent une solution.

Le paquet Python MLACS [1-2], développé au sein du laboratoire dans le cadre d'une collaboration internationale, fournit une interface pour mettre en pratique ces méthodes en maintenant une précision ab initio. Le candidat sera donc amené à utiliser le logiciel open-source ABINIT mettant en œuvre la DFT (théorie de la fonctionnelle de la densité), pour lequel notre laboratoire est l'un des principaux contributeurs. Une interface dédiée entre ABINIT, MLACS et la méthode PAFI devra donc être mise en place par le candidat.

Références :

[1] A. Castellano et al., Phys. Rev. B 106, (2022) L161110.

[2] A. Castellano et al., Comp. Phys. Comm. 316 (2025) 109730.

Déroulement : Dans un premier temps : Prise en main de la méthode PAFI et de son interfaçage avec MLACS. Une étape de validation consistera à reproduire et étudier l'influence de la température sur les barrières énergétiques à l'origine de la transition 9R-CFC.

Dans un second temps : Adaptation du formalisme et de l'implémentation de PAFI, pour permettre un échantillonnage à pression imposée le long de la coordonnée de réaction. Cette extension méthodologique constitue le cœur scientifique du projet et nécessitera un travail de développement à l'interface entre la théorie de l'intégration thermodynamique contrainte et son implémentation pratique dans MLACS.

Une fois cette extension validée, elle sera appliquée au calcul systématique des γ -surfaces et des barrières de glissement des dislocations partielles de Shockley en fonction de la température et de la pression, en lien direct avec les résultats déjà obtenus à 0 K sur le cuivre.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 11/02/2026

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : Formation en Physique du Solide.

Un attrait pour la programmation informatique est nécessaire.

Méthode ab initio, Logiciel ABINIT, Développement de paquet Python.

Contacts : CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

BEJAUD Romuald

romuald.bejaud@cea.fr



Sujet : Suivi de l'évolution microstructurale dans des simulations atomistiques / In situ tracking of microstructural evolution in atomistic simulations

Contexte : Les capacités de calcul actuelles permettent désormais de réaliser des simulations atomistiques mettant en jeu des milliards, voire des milliers de milliards de particules, offrant ainsi un accès sans précédent à des phénomènes physiques critiques dans la compréhension du comportement des matériaux. Toutefois, le volume considérable de données générées constitue un verrou majeur, le stockage nécessaire au post-traitement traditionnel devenant prohibitif. Afin de répondre à cette problématique, notre équipe a développé un cadre de parallélisme haute performance au sein du code de dynamique moléculaire ExaStamp MD et de la plateforme HPC exaNBody, permettant de projeter les informations discrètes sur des grilles eulériennes tridimensionnelles afin de réaliser un regroupement (clustering) directement au cours de la simulation.

Objectif : Développer la prochaine évolution de ce cadre en passant d'une analyse statique tridimensionnelle à un suivi in situ en quatre dimensions (espace et temps) des évolutions microstructurales. Etablir des liens entre l'évolution de défauts individuels (tels que les dislocations, les macles et les cavités) et les effets collectifs gouvernant le comportement des matériaux hors équilibre. Développer un cadre robuste d'analyse temporelle intégré à notre architecture de calcul haute performance existante.

Déroulement : - Etendre les capacités actuelles de clustering in situ à un contexte spatio-temporel 4D, afin de permettre le suivi en temps réel de l'évolution de la microstructure dans des simulations comportant jusqu'à plusieurs milliers de milliards d'atomes. Ce travail impliquera la conception et l'implémentation d'outils d'analyse fondés sur les graphes pour suivre l'évolution de la distribution, de la morphologie et des mécanismes de regroupement temporel des agrégats. En exploitant la très haute résolution temporelle des simulations, il s'agira d'identifier les cinétiques et les mécanismes élémentaires des transformations microstructurales, étape indispensable pour comprendre la stabilité et les performances des matériaux soumis à des conditions extrêmes de température et de pression.
- Développer des stratégies de compression des données permettant d'extraire des informations à haute fidélité tout en préservant les performances du moteur de simulation. A terme, ce travail visera à établir des corrélations spatiales et temporelles dans un espace à quatre dimensions afin de mettre en évidence de nouveaux liens entre l'évolution microscopique des défauts et les effets collectifs macroscopiques gouvernant le comportement des matériaux hors équilibre.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 09/01/2026

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché :

Méthodes ou logiciels :	C++, MPI/Kokkos ou avec des environnements de calcul haute performance.
Autres compétences :	Doctorat en science des matériaux, physique ou calcul haute performance (HPC). Solides connaissances en dynamique moléculaire et en physique des défauts cristallins. Des connaissances en théorie des graphes ou en analyse topologique de données constitueraient un atout.

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

DUBOIS Alizée

alizée.dubois@cea.fr

LAFOURCADE Paul

paul.lafourcade@cea.fr



Sujet : Corrélations électroniques, couplage spin-orbite et magnétisme dans PuO_2 /
Electronic correlations, spin-orbit coupling and magnetism in PuO_2

Contexte : La modélisation ab initio du dioxyde de plutonium PuO_2 constitue un défi majeur en raison du caractère fortement corrélé des électrons 5f, de l'importance des effets relativistes et de la complexité de son ordre magnétique. Les approches DFT+U sont aujourd'hui largement utilisées pour décrire les propriétés du matériau et constituent la méthodologie actuellement employée au laboratoire pour l'étude de ses défauts et de ses surfaces. Cependant, la prise en compte explicite du couplage spin-orbite (SOC) et du magnétisme non colinéaire (NC) est susceptible de modifier la structure électronique et les propriétés énergétiques calculées. Une évaluation systématique de ces effets est donc nécessaire pour quantifier la robustesse des prédictions obtenues en DFT+U et déterminer leur influence sur les propriétés du matériau volumique, la formation des défauts et la stabilité des surfaces.

Objectif : L'objectif du projet est d'établir une comparaison systématique entre l'approche DFT+U actuellement utilisée au laboratoire et une description plus complète intégrant simultanément les corrélations électroniques (+U), le couplage spin-orbite (+SOC) et le magnétisme non colinéaire (+NC). L'étude sera menée avec le code ABINIT, qui permet de réaliser des simulations dans le cadre DFT+U+SOC+NC.

Déroulement : Une première étape sera consacrée au PuO_2 volumique. Les différentes descriptions électroniques et magnétiques seront comparées afin de quantifier l'influence respective de +U, +SOC et +NC sur les propriétés structurales, énergétiques et électroniques du matériau. Cette étape permettra également d'établir un protocole de calcul robuste avant son application à des systèmes de plus grande taille.

La méthodologie sera ensuite appliquée à des défauts ponctuels, en particulier aux défauts liés à la stœchiométrie en oxygène, puis aux principales surfaces de PuO_2 . L'objectif sera de déterminer dans quelle mesure l'introduction du couplage spin-orbite et du magnétisme non colinéaire modifie les énergies relatives obtenues avec l'approche DFT+U utilisée actuellement : énergies de formation des défauts, stabilité relative des terminaisons de surface et propriétés électroniques locales.

En complément, des fonctionnelles hybrides pourront être utilisées sur des systèmes de référence afin de disposer d'un niveau supplémentaire de comparaison pour la description de la structure électronique. L'objectif final sera d'établir une hiérarchie quantitative des différents niveaux de théorie et de proposer une stratégie de calcul adaptée aux études futures du PuO_2 , en conciliant précision physique et coût numérique.

Références :

- G. Jomard, F. Bottin, Physical Review B 84, 195469 (2011).

- J. T. Pegg, A. E. Shields, M. T. Storr, D. O. Scanlon, N. H. de Leeuw, Journal of Physical Chemistry C 123, 356 (2019).

- M. J. Verstraete et al., Journal of Chemical Physics 163, 164126 (2025).

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 03/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : -

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

GENESTE Grégory

gregory.geneste@cea.fr

BOTTIN François

francois.bottin@cea.fr



Sujet : Interaction spin-réseau par simulations ab initio et Machine Learning / Spin-lattice interaction in Machine Learning assisted ab initio simulations

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 : L'objectif de ce projet postdoctoral est donc double :

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

Références :

- [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 du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : -

Contacts : CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

BOTTIN François

francois.bottin@cea.fr



Sujet : Modélisation atomique d'actinides par modèles machine learning / Atomic modelization of actinide oxydes using machine learning

Contexte : Une modélisation prédictive à l'échelle atomique des oxydes d'actinides est cruciale pour l'étude de leur comportement sous irradiation, que ce soit dans les centrales ou les sous-marins nucléaires. Une partie des modèles de dynamique moléculaire repose sur les potentiels machine learning, modèles entraînés sur des données ab-initio et permettant d'effectuer des simulations à grande échelle tout en conservant une grande précision. Certains d'entre eux ont été utilisés pour modéliser l'oxyde d'uranium. Une modélisation équivalente pour l'oxyde de plutonium est encore à développer. De plus, une grande diversification des modèles machine learning s'est récemment opérée dans la littérature, amenant des méthodologies différentes et reposant sur des logiciels divers. Il convient donc d'établir la pertinence de ces modèles pour les applications du CEA, et de créer une interface commune pour leur utilisation. Une base de données d'entraînement est déjà disponible pour commencer ce projet.

Objectif : Le post-doctorat vise à construire des modèles de dynamique moléculaire basés sur l'apprentissage automatique pour l'oxyde de plutonium, en s'appuyant sur des données ab-initio déjà existantes. Ce travail inclut le développement d'interfaces simples pour l'entraînement des modèles, l'évaluation et la comparaison des différents modèles présents dans la littérature en définissant une "bonne" métrique pour déterminer le compromis coût de calcul/précision pour les applications du CEA, notamment pour les simulations à grande échelle. La mise en place et la comparaison des méthodes d'active-learning afin d'enrichir la base de données d'entraînement est une partie intégrante du travail. Les simulations seront effectuées grâce au code exaStamp, développé au sein de l'équipe de travail.

Compétences acquises : Modélisation à l'échelle atomique ; Compétences en apprentissage automatique ; Analyse, comparaison et synthèse de différentes méthodologies et modèles ; Compétences en programmation et en traitement de données ; Collaboration avec des experts de plusieurs disciplines.

Déroulement : - Revue bibliographique : Etude des modèles de machine learning existants pour les oxydes d'actinides ; Identification des méthodologies les plus pertinentes pour l'oxyde de plutonium.

- Développement des modèles : Entraînement des modèles de machine learning sur les données ab-initio ; Développement de potentiels pour les simulations atomistiques.

- Validation et évaluation : Comparaison des performances des différents modèles ; Evaluation de la précision et de l'efficacité des modèles développés ; Méthodes d'active-learning.

- Application et analyse : Utilisation des modèles pour étudier le comportement de l'oxyde de plutonium sous irradiation ; Analyse des résultats et rédaction des rapports.

- Collaboration et communication : Collaboration avec les experts du domaine au sein du CEA ; Rédaction d'articles scientifiques et présentation des résultats.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/04/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Python, Bash.

Autres compétences : Profil recherché : Doctorat en mathématiques, physique, science des matériaux, ou domaine connexe. Expérience en modélisation atomistique, dynamique moléculaire, et apprentissage automatique. Compétences en programmation (Python ou autre) et en traitement de données. Des connaissances en calculs ab-initio et en développement de potentiels pour les simulations atomistiques sont un plus. Capable d'être autonome et de travailler en équipe.

Contacts : CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

SANTET Régis

regis.santet2@cea.fr



Sujet : Diagonalisation par filtrage spectral pour la structure électronique / Development of a spectrum filtering diagonalization algorithm for electronic structure calculations

Contexte : Les calculs de physique quantique basés sur le formalisme de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) dans l'approche de Kohn et Sham ont connu un essor très important dans les dernières décennies ; en effet, même si les principes théoriques sont anciens, il n'ont pu être mis en œuvre que grâce à l'utilisation de super-calculateurs suffisamment puissants pour résoudre les équations de la mécanique quantique. Cette constante évolution de la puissance de calcul disponible ouvre des perspectives toujours nouvelles vers des simulations de plus en plus grandes ou précises. Cependant, pour tirer parti de cette puissance numérique, les codes de calcul doivent s'adapter, au niveau des algorithmes et des modèles de programmation, dans un processus continu ; ce qui constitue, à chaque génération de super-calculateur, un réel défi.

Objectif : Dans notre laboratoire, nous participons au développement du logiciel open-source ABINIT, dans le cadre d'un projet international. Pour décrire les fonctions électroniques, ABINIT utilise une base d'ondes planes. Les propriétés des électrons sont obtenues par la résolution auto-cohérente d'un système aux valeurs propres. Il s'agit, à chaque étape d'un problème de point fixe, de rechercher les vecteurs/valeurs propres de cet opérateur complexe qu'est le Hamiltonien d'un électron. Seules les valeurs propres les plus basses sont recherchées ; des algorithmes de diagonalisation itératifs sont utilisés. Ces algorithmes reposent presque tous sur les mêmes briques de bases : des étapes d'estimation des vecteurs d'essai ou de leur sous-espace, des applications d'une procédure de Rayleigh-Ritz pour raffiner ces vecteurs propres à partir du sous-espace. Le dimensionnement du problème nécessite l'utilisation de supercalculateurs et d'algorithmes adaptés. Les dernières générations de calculateurs font un usage intensif des accélérateurs de type GPU qui mettent à disposition une très grande quantité de calcul parallèle sur des opérations simples. Après portage sur GPU, les algorithmes de diagonalisation sont tous confrontés à la même problématique : la procédure de Rayleigh-Ritz devient l'étape prédominante et limitante. La seule possibilité pour franchir ce "mur" est donc d'en limiter l'usage ou réduire la dimension de son sous-espace d'application. Pour cela, il faut se tourner vers une nouvelle génération d'algorithmes, tels que, notamment, les algorithmes de "filtrage spectral". L'objectif de ce post-doctorat est de poursuivre le développement d'un algorithme de filtrage spectral en base d'ondes planes, de dériver les formules mathématiques pour modéliser sa complexité et sa convergence. L'enjeu principal sera d'innover pour faire décroître, à la fois, la complexité mathématique et l'empreinte mémoire de l'algorithme.

Déroulement : Année 1 : Mathématiques, prototypage.
Année 2 : Implantation, tests.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Langages de programmation (dont Fortran, C).

Autres compétences : Mathématiques appliquées, programmation parallèle (HPC).

Contacts : CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

TORRENT Marc

marc.torrent@cea.fr



Sujet : Conception et modélisation d'expériences d'impacts sans choc / Conception and modelization of shockless impact experiments

Contexte : Afin de tester le comportement des matériaux sous forte pression et à grande vitesse de déformation, il est courant d'utiliser un lanceur pour réaliser des impacts de plaques. Dans cette configuration, une plaque est propulsée à grande vitesse (> 1000 m/s) contre une cible. La mesure de la vitesse de cette dernière permet d'extraire des informations utiles pour la modélisation de ces expériences dans des codes d'hydrodynamique rapide. Cependant, dans cette configuration, la cible subit obligatoirement un choc, ce qui limite les possibilités d'études, en particulier pour la plasticité ou les changements de phases.

Ces dernières années, de nouvelles techniques, comme la fabrication additive permettent de réaliser des objets métalliques présentant des formes ou des compositions variées. Nous souhaitons donc utiliser ces techniques afin de proposer des dispositifs d'impact de plaques comme les impacteurs à gradients de densité afin de varier les types de sollicitations.

Objectif : Le but de ce post-doctorat est de proposer des configurations expérimentales qui permettent de réaliser des expériences dynamiques dans lesquelles la forme temporelle de la pression d'impact est réglée par le concepteur de l'expérience. En particulier, les impacteurs à gradient de densité, réalisés en mélangeant deux matériaux avec une fraction volumique qui évolue en fonction de l'épaisseur semblent être de bons candidats. Cependant, ils sont difficiles à réaliser et leur modélisation pose également de nombreux challenges scientifiques, en particulier dans les codes d'hydrodynamique rapide.

Le sujet couvre donc des domaines très vastes, allant de la compréhension des méthodes de fabrication, de la modélisation du comportement mécanique des métaux en sollicitations très rapides jusqu'aux domaines des expériences sous choc.

Déroulement : Après une première phase d'étude bibliographique, sur les méthodes de fabrication et sur les dispositifs déjà existants comme les impacteurs à gradient de densité, une seconde phase sera consacrée à la modélisation de ces matériaux dans un code hydrodynamique rapide avant de proposer une ou plusieurs techniques et géométries d'expériences qui seront testées à la suite de ce post-doctorat.

Des phases de formations sur ces différentes composantes (en particulier, la modélisation pour le code hydrodynamique et les expériences de choc) sont prévues au terme des différentes étapes.

Durée du contrat : 1 an

Démarrage souhaité : 09/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : -

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

BOLIS Cyril

cyril.bolis@cea.fr

CARUEL Marie

marie.caruel@cea.fr



Sujet : Conception, fabrication et caractérisation du spectromètre SAABRE / Design, fabrication and characterization of the SAABRE spectrometer

Contexte : L'interaction d'un laser de puissance avec la matière génère des X révélateurs des mécanismes physiques en jeu. Le "Bremsstrahlung cannon" (BC) est un outil de référence pour caractériser ce rayonnement induit par des électrons chauffés et/ou accélérés par l'interaction du laser avec un plasma. Le BC est un empilement de films sensibles aux rayons X, intercalés avec des filtres de natures et d'épaisseurs adaptées. Grâce à ce filtrage sélectif, chaque film détecte une fraction de plus en plus énergétique du rayonnement à mesure qu'il pénètre dans l'empilement. La mesure de la dose absorbée par chaque couche permet d'accéder au spectre X incident. Cependant les films du BC doivent être extraits de l'enceinte d'expérience pour être scannés après chaque tir. Ces manipulations entravent l'usage des BC sur les lasers multi-petawatt tirant à haute cadence de tir et freinent leur déploiement sur les installations dédiées à l'étude de la Fusion par Confinement Inertiel (LMJ-PETAL).

Objectif : Le Spectromètre Actif d'Absorbants pour le Bremsstrahlung Rayonné lors de l'interaction laser-plasma (SAABRE) propose d'utiliser des semi-conducteurs comme détecteurs X actifs au cœur du BC à la place des films passifs utilisés jusqu'ici.

Le.a postdoctorant.e, guidé.e par ses encadrants, prendra en charge le développement de l'instrument depuis sa conception jusqu'à son interface d'utilisation en passant par son étalonnage et son utilisation lors des campagnes expérimentales du projet EUROPA (www.europa-project.eu).

Déroulement : Cinq détecteurs : Silicium (Si), Tellurures de Cadmium (CdTe), Cadmium-Zinc (CZT), Arséniure de Gallium (GaAs) et Pérovskites halogénées seront étudiés pour équiper le spectromètre. Leurs réponses aux fortes doses et leurs tenues aux flux seront caractérisés expérimentalement et par simulations Tcad couplés à des simulations Monte-Carlo. Des configurations de l'empilement de filtres et de détecteurs seront déterminées par simulation Geant4 en fonction du type de spectre de Bremsstrahlung attendu. Un prototype configurable sera construit et instrumenté pour permettre une lecture instantanée des doses détectées par les différents capteurs. Un logiciel de pilotage et d'analyse permettra d'obtenir aisément le spectre X rayonné. Le prototype sera calibré sur un générateur de rayonnement X de haute énergie puis sera utilisé en campagnes expérimentales sur des lasers de puissance européens. L'implémentation de SAABRE sur le LMJ-PETAL sera aussi étudiée voire même testée pendant le CDD. Prise en charge de l'intégralité du développement de l'instrument, depuis sa conception jusqu'à son étalonnage et son utilisation in situ. Ce travail qui utilisera les ressources et connaissances du CEA/DAM se déroulera en étroite collaboration avec le consortium du projet EUROPA et donnera lieu à au moins deux publications (caractérisation des semi-conducteurs et caractérisation du SAABRE) et des communications en conférences.

Durée du contrat : 2 ans

Démarrage souhaité : 11/02/2026

Lieu de travail : CEA Cesta - BP 2 - 33114 Le Barp

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Simulation Monte Carlo (G4), Physique expérimentale.

Autres compétences : Le.a candidat.e devra maîtriser l'interaction particule-matière et aimer la physique expérimentales sur des grosses installations (laser de puissance, accélérateurs de particules). Des notions d'électronique sont les bienvenues ainsi qu'un goût pour la programmation.

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

TARISIEN Medhi

medhi.tarisien@cea.fr

BOUTOUX Guillaume

guillaume.boutoux@cea.fr



**Sujet : HED models development into the ESTHER code and experimental applications /
HED models development into the ESTHER code and experimental applications**

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, ...). 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 : - 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 du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/04/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -
Autres compétences : -

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

LECHERBOURG Ludovic

ludovic.lecherbourg@cea.fr



Sujet : Des atomes aux planètes : étude ab initio des intérieurs planétaires / From atoms to planets: an ab initio study of planetary interiors

Contexte : Depuis la découverte de la première exoplanète en 1995 (récompensée par un prix Nobel en 2019), plus de 4000 nouveaux mondes ont été détectés. Leur immense diversité ainsi que leurs grandes différences par rapport aux objets du Système Solaire stimulent une recherche fondamentale intense pour comprendre leur structure, leur évolution ainsi que leur habitabilité. Les pressions colossales qui peuvent être atteintes dans de tels objets, jusqu'à 1 TPa soit 10 millions d'atmosphères, et les températures élevées de l'ordre de 10000 K induisent des modifications importantes dans les propriétés de la matière. La caractérisation des matériaux sous de telles conditions extrêmes ainsi que des différentes transitions de phases qu'ils peuvent subir est essentielle à la compréhension des intérieurs planétaires ainsi qu'à la détermination de l'habitabilité des exoplanètes.

Objectif : Au cours des deux dernières décennies des progrès immenses ont été faits dans le domaine des simulations dites "premiers principes" qui permettent maintenant de simuler les matériaux avec précision en incluant les effets quantiques notamment. Toutefois, la caractérisation thermodynamique fine et particulièrement celle des transitions de phase par les simulations doit être améliorée et c'est l'objectif de ce post-doctorat. Le candidat.e devra contribuer à l'implémentation de méthodes numériques spécifiques au calcul de l'entropie d'un matériau ainsi que de méthodes permettant la détermination des équilibres de phase dans des conditions extrêmes. Il/elle utilisera ensuite ces nouveaux outils pour déterminer des diagrammes de séparation de phase dans les planètes géantes ainsi que des courbes de fusion pour les Super-Terres. Ces informations seront confrontées à des mesures expérimentales haute-pression dans les années à venir et permettront de construire les modèles astrophysiques de demain.

Déroulement : Les développements numériques se feront dans le code Abinit qui permet d'utiliser la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) pour calculer la structure électronique d'un matériau et ainsi ses propriétés thermodynamiques. Il s'agit d'un code massivement parallèle, objet d'une large collaboration internationale et écrit principalement en Fortran. Le travail s'effectuera à la DIF mais des collaborations sont prévues avec le CRAL de l'ENS Lyon sur le plan théorique ainsi qu'avec des astrophysiciens et des expérimentateurs pour l'application des techniques développées.

Durée du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Python, Fortran.

Autres compétences : Bonnes connaissances en développement numérique, physique statistique, mécanique quantique et thermodynamique. Une sensibilisation aux outils d'apprentissage automatique est un plus.

Contacts : CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

SOUBIRAN François

francois.soubiran@cea.fr

Sujet : Problème à N-corps électronique sur ordinateur quantique / Electronic many-body problem on a quantum computer

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 elle 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 : - 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 Bruyères-le-Châtel.

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 du contrat : 2 ans + 2 x 1an renouvelables

Démarrage souhaité : 01/01/2027

Lieu de travail : CEA DAM Île-de-France - Bruyères-le-Châtel - 91297 Arpajon

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : -

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr

AMADON Bernard

bernard.amadon@cea.fr

TORRENT Marc

marc.torrent@cea.fr