

**Sujet : Développement de la TDDFT pour l'étude des matériaux sous irradiation /
Implementation of TDDFT for the study of materials under irradiation**

Contexte : La modélisation du comportement des matériaux irradiés est essentielle pour de nombreuses applications, telles que la conception des réacteurs nucléaires, le développement de traitements médicaux par protons ou l'électronique en environnement radiatif. Une compréhension fine des mécanismes d'interaction entre les particules incidentes et le matériau à l'échelle atomique est nécessaire pour décrire précisément les effets de l'irradiation. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) s'est imposée comme l'une des méthodes les plus efficaces pour étudier les propriétés des matériaux, mais elle se limite à l'état fondamental et ne permet pas de décrire les excitations électroniques induites par irradiation. La DFT dépendante du temps (RT-TDDFT) permet de simuler la réponse dynamique des électrons à une perturbation extérieure et constitue un cadre particulièrement adapté à l'étude de la réponse des matériaux à l'irradiation.

Objectif : Cette thèse s'inscrit dans le cadre du développement de la méthode RT-TDDFT dans le code ABINIT, l'un des principaux codes de DFT, en partie développé dans notre équipe. Cette méthode permet de simuler directement la réponse temporelle des électrons au passage d'un projectile et a déjà démontré son efficacité pour le calcul du pouvoir d'arrêt électronique et l'étude des processus induits par irradiation.

L'objectif principal de la thèse sera le développement de la dynamique d'Ehrenfest, qui permet de coupler la dynamique des électrons décrite par RT-TDDFT à la dynamique moléculaire des noyaux. Ce couplage est indispensable pour décrire finement les phénomènes induits par irradiation, tels que le pouvoir d'arrêt électronique ou les processus de radiolyse.

Le travail comprendra le développement, l'implémentation et la validation de cette méthode dans ABINIT, ainsi que son application à des cas d'étude représentatifs afin d'évaluer sa robustesse et sa pertinence dans des conditions d'irradiation réalistes.

Déroulement : - Première année : Prise en main de la TDDFT et du code ABINIT. Tests et validation de l'implémentation, identification de potentielles limitations. Bibliographie concernant la RT-TDDFT et la dynamique d'Ehrenfest. Démarrage de l'implémentation de la dynamique d'Ehrenfest.

- Deuxième année : Finalisation de l'implémentation de la dynamique d'Ehrenfest. Tests et validation de l'implémentation. Bibliographie concernant le calcul du pouvoir d'arrêt et des processus de radiolyse. Premiers calculs pouvoir d'arrêt et/ou processus de radiolyse.

- Troisième année : Calculs pouvoir d'arrêt et/ou processus de radiolyse. Rédaction de publications associées.

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 10/01/2027

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : -

Autres compétences : Niveau Master 2 ou diplôme équivalent.
Bonne connaissance des bases de la physique quantique et de la matière condensée. Goût prononcé pour le développement informatique. Connaissance de l'environnement Linux, du langage Fortran ou de la DFT non indispensable, mais constituerait un atout important.

Aspect académique : Responsable : BRIEUC Fabien
fabien.brieuc@cea.fr

Laboratoire associé : Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes (LMCE),
Université Paris-Saclay

Ecole doctorale : Ecole Doctorale Physique en Île-de-France (EDPIF)

Contacts : CEA DAM Île-de-France

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

BRIEUC Fabien

fabien.brieuc@cea.fr

Sujet : Vers une modélisation probabiliste de la rupture des métaux sous choc / Probabilistic modelling of spall fracture

Contexte : Comment un métal se fracture-t-il en quelques dizaines de ns lorsqu'il est soumis à une onde de choc ? Malgré les progrès des simulations numériques, les mécanismes collectifs responsables de la rupture restent encore mal compris. Cette thèse vise à établir un lien quantitatif entre la microstructure observée sur les surfaces de rupture et les modèles micromécaniques utilisés pour prédire l'endommagement sous choc. Les modèles micromécaniques actuels décrivent la nucléation aléatoire puis la croissance d'une population de cavités présentant une distribution de tailles à partir d'un processus de germination aléatoire [1]. Bien qu'ils reproduisent avec une grande fidélité la réponse macroscopique des matériaux [2], leur validation à l'échelle microscopique reste très incomplète. En particulier, les distributions de tailles des cavités observées au moment de la rupture étaient jusqu'à récemment quasiment absentes de la littérature.

Objectif : Une précédente thèse réalisée au laboratoire a permis de constituer une base de données originale en mesurant systématiquement, sur des surfaces de rupture d'aluminium, les distributions de tailles et les densités de cavités nucléées [3]. Cette base de données permet, pour la première fois, une validation quantitative des modèles micromécaniques à l'échelle de la population de cavités. La thèse combinera analyse expérimentale et modélisation numérique.

[1] A. Molinari et al. Journal of Mechanics and Physics of Solids, (53):1476–1504, 2005.

[2] N. Jacques et al. International Journal of Fracture, (162):159–175, 2010.

[3] C. Thouenon et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 206:106406, 2026.

Déroulement : - Constitution d'une base de données expérimentale originale sur le tantale. L'étudiant.e participera à des campagnes de tirs par canon à gaz et par laser afin de produire un jeu de données couvrant une large gamme de taux de sollicitation. Les surfaces de rupture obtenues seront ensuite analysées afin d'extraire les distributions de tailles et les densités de cavités nucléées. Ce travail permettra de constituer une base de données pour le tantale, indispensable à la validation des modèles probabilistes développés au cours de la thèse.

- Développement d'un modèle probabiliste d'endommagement. L'étudiant.e implémentera, dans un code lagrangien 3D développé au CEA/DAM, un modèle stochastique décrivant la nucléation et la croissance d'une population de cavités, développé par N. Jacques et al. [2]. Ce modèle décrit explicitement l'évolution d'une distribution de tailles de cavités, permettant une comparaison directe avec les distributions mesurées expérimentalement sur l'aluminium et le tantale. Au-delà, la thèse visera à développer une nouvelle classe de modèles probabilistes capables de décrire la phase de coalescence des cavités. L'objectif final est de prédire l'apparition de la rupture macroscopique à partir de l'évolution statistique de la microstructure.

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 09/01/2027

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Python.

Autres compétences : Goût prononcé pour la modélisation numérique, le traitement de données et la comparaison simulation/expérience.
Autonomie, curiosité scientifique et intérêt pour les phénomènes multi-échelles.

Aspect académique : Responsable : WILLOT François

Laboratoire associé : Centre Statistiques et Images

Ecole doctorale : Ingénierie des Systèmes, Matériaux, Mécanique et Energétique (ISMME)

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

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

DUBOIS Alizée

alizee.dubois@cea.fr

WILLOT François

francois.willot@mines-paristech.fr

Sujet : Mesures d'équation d'état par diffraction X sur installation laser de puissance / X-ray diffraction for equation of state measurements on large laser facilities

Contexte : Les expériences de compression dynamique sur les grandes installations laser sont de plus en plus utilisées pour déterminer les propriétés des solides et des liquides de quelques GPa et centaines de Kelvin jusqu'à plusieurs TPa et milliers de Kelvin. Cependant, les échelles de temps caractéristiques de ces expériences, de l'ordre de la ns, ont longtemps été un frein au développement des mesures structurales directes comme la diffraction X. Cette dernière technique s'avère pourtant très intéressante, car elle permet d'accéder directement aux changements de structure atomique dans les solides comprimés sans nécessiter de calculs complexes annexes. En particulier, ce diagnostic permet d'identifier la nature et la densité des phases solides ainsi que l'éventuel passage en phase liquide des matériaux d'intérêt, ou encore d'étudier la cinétique de leurs différentes transitions de phase.

Objectif : Le développement de sources X sub-nanoseconde sur grandes installations, via lasers intenses, a permis des diagnostics avancés. Un diagnostic de diffraction X a été mis au point sur LULI2000, permettant d'étudier les transitions de phases de matériaux cristallins sous hautes pressions.

Nos premières études ont porté sur les changements de phase de métaux de transition purs sous choc, mesurant aussi les courbes d'Hugoniot grâce à des mesures macroscopiques (vitesses, pression, température). Récemment, les diagrammes de phase d'autres matériaux ont été étudiés avec une cinétique inédite, via des profils laser progressifs explorant les transitions au-delà de l'Hugoniot principale.

En exploitant ces données pour construire des diagrammes de phase hors-Hugoniot sur larges plages de pressions et densités, nous poursuivrons les études sur de nouveaux matériaux, plus exotiques, comme des mélanges. Ces expériences pourront être réalisées sur LULI2000 ou eu-XFEL (Hambourg), offrant des sources X ultra-brèves adaptées.

Déroulement : Tout d'abord, l'étudiant.e analysera les données des dernières expériences de diffraction X afin de se familiariser à la fois avec les méthodes expérimentales utilisées pour étudier la matière dense et tiède à l'aide d'un laser de puissance, avec les outils de dépouillement qu'il.elle se devra de compléter, ainsi qu'avec les simulations hydrodynamiques. Ceci lui permettra ensuite de préparer, de réaliser et d'analyser les différentes campagnes expérimentales citées ci-avant.

Pendant ce doctorat, l'étudiant.e bénéficiera d'un co-encadrement multidisciplinaire CEA/LULI composé d'expérimentateurs laser et synchrotron et de théoriciens, ce qui pourra aussi l'amener à participer à des expériences sur des installations synchrotron (ESRF, Grenoble) et XFEL (Hambourg).

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 10/04/2027

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Python.

Autres compétences : Connaissances en optique expérimentale. Notions de physique du solide / physique des plasmas appréciées.

Aspect académique : Responsable : BENUZZI-MOUNAIX Alessandra
alessandra.benuzzi-mounaix@polytechnique.edu

Laboratoire associé : Laboratoire LULI, Ecole Polytechnique

Ecole doctorale : Ecole Doctorale de l'Institut Polytechnique de Paris (EDIPP)

Contacts : CEA DAM Île-de-France

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

DENOEUDE Adrien

adrien.denoead2@cea.fr

BRYGOO Stéphanie

stephanie.brygoo@cea.fr



**Sujet : Spectres Raman théoriques appliqués aux minéraux de la surface de Mars /
Development of theoretical Raman spectra with application on minerals from the surface
of Mars**

Contexte : Les rovers martiens ont révélé une minéralogie différente de ce que l'on trouve sur Terre, façonnée par l'ancienne hydrosphère suivie d'un environnement sec et froid, favorisant la formation de perchlorates, ou de phases vitreuses mixtes de sels silicates qui restent étonnamment stables sur Mars. Les données récentes de spectrométrie Raman confirment leur présence, soulignant l'opportunité d'une recherche approfondie. Comprendre ces minéraux pourrait offrir de nouveaux éclairages sur la chimie martienne et l'évolution planétaire.

Ici, nous souhaitons calculer les spectres Raman théoriques de minéraux martiens en utilisant la théorie de perturbation de la fonctionnelle de la densité. Nous voulons obtenir la position et l'intensité des pics, mais aussi leur largeur. Ces paramètres seront utilisés pour identifier les modes de vibrations atomiques et seront comparés et interprétés à la lumière des mesures effectuées.

Objectif : Les calculs de spectres Raman des minéraux seront réalisés avec le logiciel ABINIT, un projet international collaboratif à haute visibilité. Il faudra implémenter des dérivées de l'énergie du système (ordres 3 et 4), où les perturbations sont des déplacements atomiques ou des champs électriques, dans le cadre de l'approche "Projector Augmented Wave" (PAW), précise et efficace. L'ensemble des développements sera intégré à ABINIT et mis à disposition de la communauté scientifique.

Le.a candidat.e retenu.e sera co-dirigé.e entre les groupes de l'IPGP (Paris) et du CEA (Bruyères-le-Châtel, au sud de Paris). L'IPGP est un institut de recherche en géosciences associé au CNRS et l'université Paris-Cité ; le groupe de R. Caracas est très actif en simulation numérique des minéraux. Le groupe du CEA de M. Torrent développe le logiciel ABINIT et est très actif en théorie de la fonctionnelle de la densité et en calcul hautes performances.

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

Déroulement : Pour commencer, il faudra prendre en main des diverses théories impliquées : la DFPT, l'approche PAW, les réponses d'un système à perturbation.

Dans un second temps, il faudra écrire rigoureusement les équations, à savoir l'expression des dérivées de l'énergie qui sont nécessaires pour le calcul de la largeur des pics Raman.

Il faudra implémenter les formules dans le code ABINIT et/ou divers scripts et vérifier la justesse de l'implémentation. En fin de thèse, des simulation numériques (spectres dRaman de minéraux) seront effectuées. Les résultats seront confrontés aux mesures et interprétés.

La collaboration entre le CEA et l'IPGP se fera par des séjours dans les 2 laboratoires, le lieu d'accueil principal étant celui du CEA à Bruyères-le-Châtel.

Durée du contrat : 3 ans

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 : Compétences en informatique dans des langages de haut niveau, comme Python, et en C++ ou Fortran.
Solides connaissances en physique ou chimie de la matière condensée

Aspect académique : Responsable : TORRENT Marc
marc.torrent@cea.fr

Laboratoire associé : Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes (LMCE),
Université Paris-Saclay

Ecole doctorale : Ecole Doctorale de Physique en Île-de-France (EDPIF)

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

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

TORRENT Marc

marc.torrent@cea.fr

CARACAS Razvan

caracas@ipgp.fr



Sujet : Métamodèles multi-fidélité d'équations d'état pour l'hydrodynamique / Multifidelity surrogate modeling of equation of state for hydrodynamics

Contexte : La simulation de phénomènes physiques en régime extrême (astrophysique, choc laser, fusion inertielle, ...) repose sur des équations d'état (EOS) décrivant la matière sur plusieurs décades en densité et en température. Aucun modèle unique ne couvre ce domaine : les données proviennent de physiques et de codes divers (DFT-MD ab initio, dynamique moléculaire classique, modèles analytiques, ...), de coûts et de précisions très hétérogènes. Construire une EOS cohérente impose donc de fusionner ces sources tout en respectant les contraintes de la thermodynamique (relations de Maxwell, cohérence et stabilité thermodynamiques). Le stage se déroulera au sein d'un laboratoire spécialisé en physique de l'atome, réunissant physiciens et mathématiciens appliqués, où sont produites et exploitées ces données. Les codes utilisés seront Arché pour la physique statistique et ESTHER pour l'hydrodynamique.

Objectif : La régression par processus gaussiens multi-fidélité offre un cadre naturel : elle combine quelques simulations haute-fidélité coûteuses à de nombreuses simulations basse-fidélité et quantifie l'incertitude résiduelle, information essentielle lorsque le métamodèle est appelé des millions de fois par un code d'hydrodynamique.

Déroulement : - Première année : Consolidation du métamodèle multi-fidélité contraint, montée en dimension, construction de tables d'EOS complètes.
- Deuxième année : Planification séquentielle d'expériences numériques pour décider, à budget HPC fixé, quelles simulations Arché lancer et à quelle fidélité ; premiers résultats théoriques sur les garanties de convergence non asymptotiques du co-krigeage.
- Troisième année : Couplage effectif à ESTHER sous contrainte de coût d'évaluation, propagation de l'incertitude du métamodèle sur des cas 2D ; valorisation et rédaction.

Durée du contrat : 3 ans

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 : -

Aspect académique : Responsable : GARNIER Josselin
josselin.garnier@cea.fr
Laboratoire associé : CMAP
Ecole doctorale : Ecole Doctorale de Mathématiques Hadamard (EDMH)

Contacts : CEA DAM Île-de-France 01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr
KERLEGUER Baptiste baptiste.kerleguer@cea.fr
WEENS William william.weens@cea.fr

**Sujet : Rôle de la conduction dans l'évolution d'instabilités lors de tests sur métaux /
Conduction influence on instabilities development in metals**

Contexte : Au cours d'essais de traction ou de compression plane sur des plaques métalliques, à partir d'un certain niveau de déformation fonction du régime de sollicitation et des propriétés du matériau, l'écoulement plastique devient instable ; la déformation plastique se concentre en certains points du matériau. Le développement de ces instabilités prélude au processus qui mène à la ruine du matériau. Il est donc essentiel de savoir prédire leur évolution. Si la plaque est suffisamment compacte (épaisseur comparable à la longueur) et est sollicitée suffisamment vite, pour des métaux tels le titane, le nickel ou certains aciers, ces instabilités se manifestent par des réseaux de bandes de cisaillement inclinées à 45° de la direction de sollicitation, en lesquelles se concentre la déformation plastique, donnant lieu in fine à des échauffements locaux. Ces bandes sont suffisamment rapprochées pour que la conduction thermique ait une influence significative sur leur évolution.

Objectif : La thèse consistera en l'étude du processus qui conduit à la ruine du matériau, en se focalisant sur le rôle joué par la conduction thermique, en mettant en œuvre des simulations numériques, avec, dans la phase des prémices du développement des instabilités, l'éclairage de l'Analyse Linéaire de Stabilité développée par D. Jouve. Dans cette phase, les résultats des simulations seront comparés à ceux de l'Analyse Linéaire de Stabilité, en termes de taux de croissance et de motif de localisation de la déformation plastique. Cette étude sera menée pour des lois de comportement de complexité croissante (contrainte d'écoulement fonction de la vitesse de déformation plastique, effets visqueux auxquels viennent s'ajouter les effets de la température -adoucissement thermique- et de la déformation plastique -écrouissage-). On examinera également l'incidence de l'évolution au cours du temps de la fraction du travail de la déformation plastique convertie en chaleur (le coefficient de Taylor-Quinney).

Déroulement : La thèse se déroulera en collaboration forte avec l'Université de Lorraine.

Durée du contrat : 3 ans

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 : -

Aspect académique : Responsable : MERCIER Sébastien
sebastien.mercier@univ-lorraine.fr
Laboratoire associé : LEM3
Ecole doctorale : Chimie, Mécanique, Matériaux, Physique (C2MP)

Contacts : CEA DAM Île-de-France 01 69 26 40 00
stage.dif@cea.fr
JOUVE Dominique dominique.jouve@cea.fr
DEQUIEDT Jean-Lin jean-lin.dequiedt@cea.fr

Sujet : Dynamique d'ionisation et émission radiative de plasmas de mélange / Ionization dynamics and radiative emission of mixed plasmas

Contexte : La caractérisation des plasmas chauds tels que ceux mis en œuvre dans le cadre des recherches sur la fusion s'avère indispensable dès lors qu'on cherche à en optimiser la mise en œuvre. La spectroscopie d'émission est connue pour être particulièrement bien adaptée pour la caractérisation des plasmas chauds. Dans le but de disposer d'un diagnostic simultané de la température et de la densité électroniques de ce type de milieu, il a été imaginé d'incorporer sous forme de traceurs dans un échantillon porté à l'état plasma, un couple d'éléments respectivement adaptés à la spectroscopie de couche K (sensible à la température électronique) et L (sensible à la densité électronique). Des expériences récentes, basées sur ce concept, ont fourni des résultats encourageants qui motivent le présent sujet de thèse.

Objectif : Le.a candidat.e sera amené.e à implémenter, dans un code d'hydrodynamique-radiative monodimensionnel, un traitement des effets instationnaires dans le calcul de la cinétique atomique de plasmas de mélange chauds et détendus hors équilibre thermodynamique local. A cette occasion, il.elle acquièrera des compétences en physique atomique, en physique des plasmas et en programmation. Un premier objectif sera de disposer d'une plateforme de simulation adaptée à l'interprétation des résultats d'une expérience planifiée en 2027 sur l'installation laser OMEGA du LLE de Rochester (Etats-Unis).

A l'aide de cette plateforme de simulation, le.a candidat.e cherchera à interpréter les mesures enregistrées, s'attachera à qualifier la complémentarité des analyses spectroscopiques en couche K et L et étudiera l'impact d'éventuels effets instationnaires sur le diagnostic des température et densité électroniques. A cette occasion, il.elle acquièrera des compétences en spectroscopie atomique et en simulation numérique.

Déroulement : - Première année :

Etude bibliographique de l'état de l'art.

Implémentation d'un traitement de la cinétique atomique instationnaire dans le code d'hydrodynamique-radiative.

- Deuxième année :

Interprétation des résultats expérimentaux obtenus sur l'installation laser OMEGA.

Analyse de l'impact des effets instationnaires sur la caractérisation des plasmas étudiés.

- Troisième année :

Rédaction d'un article relative à l'étude réalisée.

Rédaction du manuscrit de thèse et préparation de la soutenance.

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 10/05/2026

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Connaissance des langages de programmation PYTHON et FORTRAN.

Autres compétences : Connaissances en physique fondamentale (option physique des plasmas et/ou physique atomique).

Aspect académique : Responsable : BLANCARD Christophe
christophe.blancard@cea.fr

Laboratoire associé : Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes (LMCE),
Université Paris-Saclay

Ecole doctorale : Ecole Doctorale Ondes et Matière (EDOM)

Contacts : CEA DAM Île-de-France

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

MARTINEZ Bertrand

bertrand.martinez@cea.fr



Sujet : Transfert radiatif dans les plasmas hors d'équilibre thermodynamique local / Radiation transfer in non-local-thermodynamic-equilibrium plasmas

Contexte : Dans les plasmas chauds, le rayonnement qui traverse et interagit avec le plasma joue un rôle important dans le transfert de chaleur. Selon les gradients existant dans le plasma, et ses propriétés d'absorption et d'émission, le rayonnement peut être plus ou moins piégé au sein de zones homogènes, ou, au contraire, fuir hors de ces zones. Dans ce dernier cas, le rayonnement n'est pas en équilibre thermique avec le plasma. Un équilibre thermodynamique du plasma peut néanmoins être instauré localement par les collisions des électrons libres sur les ions. Lorsque le plasma n'est pas suffisamment dense pour cela, il est hors d'équilibre thermodynamique local (hors-ETL). Les plasmas hors-ETL existent dans la nature (couronne solaire, atmosphères stellaires, disques d'accrétions...) mais sont aussi produits en laboratoire (sources X, Z-pinch, Hohlraums). La spectroscopie d'émission de plasmas hors-ETL est aussi un outil pour le diagnostic des plasmas de fusion par confinement inertiel.

Objectif : La description des plasmas hors-ETL est un problème ardu, intimement couplé au problème du transfert de rayonnement. Dans cette thèse de nature théorique et numérique, on se propose d'élaborer un ensemble cohérent de méthodes de résolution du transfert des raies spectrales dans un plasma hors ETL, permettant le calcul de spectres émergents dans des conditions réalistes, en utilisant modèle de plasma hors ETL relativement complet.

Déroulement : Après une phase d'approche du problème et de familiarisation autour d'un modèle simplifié, on étudiera différentes méthodes de résolution du problème de transfert radiatif. L'objectif sera d'en identifier les forces et les limites, à l'aune d'une implémentation numérique utilisant des architectures modernes. On oeuvrera ensuite à construire un ensemble cohérent de méthodes permettant de résoudre le transfert dans des conditions réalistes, avec un modèle de plasma hors ETL complet. Cet effort sera structuré par la construction d'un outil dans une optique d'application de diagnostic. Pour cela, on pourra s'appuyer sur des données expérimentales disponibles, issues d'expériences passées, ou même proposer de nouvelles expériences de validation. La thèse s'effectuera au moins pour partie au sein d'un laboratoire du CEA / DAM Île-de-France.

Durée du contrat : 3 ans

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 : Niveau Master 2 en physique ou dernière année d'école d'ingénieur à forte composante de physique.
Le candidat doit présenter un intérêt pour la théorie, être autonome dans l'acquisition de connaissances à partir de la littérature, et être à l'aise avec les calculs analytiques, l'analyse numérique et la programmation scientifique.

Aspect académique : Responsable : PIRON Robin
robin.piron@cea.fr

Laboratoire associé : -

Ecole doctorale : Ecole Doctorale de Physique en Île-de-France (EDPIF)

Contacts : CEA DAM Île-de-France

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

PIRON Robin

robin.piron@cea.fr



Sujet : Etudes des mélanges dans les intérieurs de planètes / Mixtures in planetary interiors

Contexte : Avec l'exploration de plus en plus avancée des planètes de notre système solaire et la découverte de plus de 5000 exoplanètes dans des systèmes stellaires voisins, il est de plus en plus nécessaire de développer des modèles détaillés de structure et d'évolution de ces objets. Un des points d'achoppement se situe dans la caractérisation physique et thermodynamique de mélanges complexes particulièrement commun dans ces objets : mélanges hydrogène-hélium, hydrogène-eau, eau-silicates, silicates-fer... ainsi que de nombreux autres. Or, les propriétés de ces mélanges influencent très grandement l'évolution des planètes : différenciation et effet dynamo dans les planètes rocheuses, sédimentation de l'hélium dans les planètes géantes, inhibition du refroidissement des planètes glacées... Il est donc essentiel de pouvoir caractériser le comportement de ces systèmes dans des conditions extrêmes.

Objectif : Les simulations ab initio ont apporté des progrès immenses en la matière en permettant de caractériser avec précision des systèmes complexes et ce en tenant compte du caractère quantique des électrons. Ces simulations sont toutefois très exigeantes en temps de calcul et sont limitées à des systèmes de petite taille. Pour accélérer le calcul et accéder à des temps de simulation plus longs pour des systèmes beaucoup plus larges, il est possible d'utiliser des potentiels numériques calibrés sur une base de donnée de simulations ab initio à l'aide de l'apprentissage automatique.

L'objectif de ce projet de thèse est de développer des outils pour le développement de potentiels numériques hautement fidèles pour les intégrer dans différents types de simulations permettant de caractériser les transitions de phase dans des mélanges complexes.

Déroulement : Il s'agira tout d'abord de réaliser une série de simulations ab initio sur des systèmes complexes tels que le mélange eau-silicates et silicates-fer qui sont essentiels dans les planètes géantes glacées et les super-Terres. Il sera ensuite nécessaire de développer des potentiels numériques capables de reproduire le plus précisément possible l'ab initio pour ensuite les utiliser et caractériser les transitions de phases à ultra-haute pression selon plusieurs méthodologies complémentaires. Le tout permettra d'offrir des contraintes fiables sur les structures de plusieurs types de planètes ainsi que sur les scénarios de formation. Au cours de cette thèse, l'étudiant.e aura l'opportunité d'interagir avec de nombreux experts numériques, mais également de participer à des campagnes expérimentales et d'échanger avec des astrophysiciens.

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 11/02/2026

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Python, Linux.

Autres compétences : Des connaissances en physique théorique sont nécessaires, notamment en physique statistique et en thermodynamique.

Aspect académique : Responsable : SOUBIRAN François
francois.soubiran@cea.fr

Laboratoire associé : -

Ecole doctorale : Ecole Doctorale de Physique en Île-de-France (EDPIF)

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

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

SOUBIRAN François

francois.soubiran@cea.fr

BATHELLIER Didier

didier.bathellier@cea.fr

**Sujet : Fragmentation d'une nappe liquide soumise à un fort gradient de vitesse initial /
Fragmentation of a liquid sheet subjected to a strong initial velocity gradient**

Contexte : Lorsqu'une onde de choc se réfléchit sur la surface libre d'un échantillon métallique, elle interagit avec des hétérogénéités géométriques (assimilées à des défauts) produites par exemple par un outil d'usinage. La réflexion du choc suivie de la détente du matériau dans son milieu environnant peut provoquer, pour des pressions suffisamment élevées, l'éjection à très grande vitesse (plusieurs milliers de m/s) de nappes de métal en phase liquide, devant la surface libre. Ces nappes s'étirent, se fragmentent, et donnent naissance à un nuage de particules susceptible de perturber le fonctionnement de certaines expériences. Ce processus est très difficile à caractériser expérimentalement et à simuler car il se produit à des échelles spatio-temporelles difficiles d'accès, et il fait intervenir une physique de rupture de la matière que les codes de calcul actuels utilisant les équations de l'hydrodynamique ne permettent pas de reproduire de manière naturelle.

Objectif : La thèse a pour objectif de répondre à ce dernier point. Elle vise, en s'appuyant notamment sur des analyses théoriques, à prendre en compte dans les simulations les processus de fragmentation lorsque la matière, décrite par une approche continue (hydrodynamique), est soumise à de très forts taux de déformation. Une des perspectives est d'aboutir à une prédiction des distributions en tailles des particules créées à l'issue de la fragmentation des nappes en fonction de leur vitesse, et de les confronter aux données expérimentales disponibles. Dans un premier temps, l'objectif sera de référencer l'ensemble des mécanismes physiques et des techniques numériques existants pour traiter la fragmentation dans le cas des faibles taux de déformation, et de voir dans quelle mesure celles-ci peuvent également s'appliquer à notre problématique. Si elles s'avèrent inefficaces et/ou insuffisantes, l'étudiant.e devra identifier dans un second temps, par le biais d'analyses théoriques, de nouveaux mécanismes de fragmentation, les modéliser, et enfin les implanter dans les simulations. Il/elle pourra s'appuyer sur des résultats expérimentaux et de simulation disponibles au sein des deux laboratoires d'accueil. En fonction de l'avancée des travaux, une troisième étape consistera à étudier l'influence de chacun des paramètres du ou des modèles retenus dans l'estimation des tailles de particules. Les études numériques seront réalisées au moyen du code (ouvert) Basilisk.

Déroulement : Le projet se fera en cotutelle entre le LadHyX et le CEA. Il sera localisé alternativement au LadHyX, à l'École Polytechnique (Palaiseau), et au CEA DAM île-de-France (Arpajon).

Durée du contrat : 3 ans

Démarrage souhaité : 10/05/2026

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

Profil recherché : Méthodes ou logiciels : Mécanique des fluides, Mathématiques, Langage C.

Autres compétences : Solide formation en mécanique des fluides, en mathématiques. Bonne maîtrise de la programmation en langage C.

Aspect académique : Responsable : JOSSERAND Christophe
christophe.josserand@polytechnique.edu

Laboratoire associé : LadHyX

Ecole doctorale : Ecole Doctorale de l'Institut Polytechnique de Paris (EDIPP)

Contacts :

CEA DAM Île-de-France

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

DURAND Olivier

olivier.durand@cea.fr

PINEAU Nicolas

nicolas.pineau@cea.fr