

Recruteur	CEA
Adresse	1
Code postal	91190
Ville	GIF SUR YVETTE
Référence	2023-28110-S1136
Titre de l'offre	Post-Doctorat - Bac+5 - Application de la Chimie Quantique à l'Étude de la Stabilité Thermique H/F
Description de la mission	<p>La Direction des Applications Militaires (DAM) du CEA, au coeur des enjeux de la dissuasion nucléaire Française, cherche ses futurs talents. Organisme inclusif, le CEA est handi-accueillant : nos emplois sont ouverts à toutes et tous.</p> <p>Associer les forces et les compétences de chacun pour atteindre nos objectifs est l'une de nos valeurs partagées par nos 4 600 salariés, répartis sur 5 centres.</p> <p>Les 600 salariés du centre du Ripault, situé en région Centre Val de Loire, se mobilisent pour concevoir, développer et fabriquer des matériaux innovants pour les composants non nucléaires des armes de la dissuasion. Ils contribuent également au soutien technique des autorités dans la lutte contre la prolifération nucléaire et le terrorisme et participe à la transition énergétique à travers les programmes du CEA sur les énergies bas-carbone.</p> <p>Pour être pleinement opérationnels, les 19 laboratoires du Ripault sont soutenus par des équipes fonctionnelles spécialisées dans les domaines des Ressources Humaines, des Achats/Finances, de la Sécurité, de la Conduite de travaux, de la Logistique/Transport, de l'Informatique et de la Santé.</p> <p>Venez vous investir au service de la Défense et de la Sécurité de notre pays, relever des défis scientifiques et techniques avec des moyens technologiques d'exception ! Vous contribuerez à l'excellence de la recherche et à la compétitivité de l'industrie française en construisant votre avenir dans un environnement varié et respectueux.</p> <p>Les procédures développées jusqu'à présent en vue d'estimer la température de décomposition des substances moléculaires, et en particulier des matériaux énergétiques, reposent sur une description plus ou moins détaillée des molécules, et éventuellement des empilements cristallins auxquels elles donnent lieu. Au cours de ce post-doc, on envisage d'introduire un ingrédient supplémentaire susceptible d'avoir une influence significative sur la stabilité thermique, à savoir les mécanismes de décomposition accessibles au composé. Ces mécanismes seront étudiés à l'aide des outils modernes de chimie quantique.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Constitution d'une base de données de composés dont la décomposition est bien distincte de la fusion. 2. Calcul des températures de décomposition de ces composés à l'aide du modèle 'de fragments' établi au DXPL 3. Identification des composés pour lesquels le modèle de fragments conduit à aux estimations les moins précises. 4. Détermination des mécanismes de décomposition des composés identifiés. 5. Interprétation des erreurs du modèle de fragments à la lumière des mécanismes calculés. Conformément aux engagements pris par le CEA en faveur de l'intégration des personnes en situation de handicap, cet emploi est ouvert à tous et toutes. Participant à la protection nationale, une enquête administrative est réalisée pour tous les salariés du CEA afin d'assurer l'intégrité et la sécurité de la nation. <p>Goût pour le travail sur ordinateur</p> <p>Langage Python, codes de chimie quantique et simulation moléculaire</p> <p>Bac +5 Pour postuler cliquer ici.</p>
Type de contrat	Stage
Télétravail	Non spécifié
Localisation	, Centre-Val de Loire
Pays	Array
Expérience	Expérimenté (3-10 ans)
Profil	Etudes scientifiques et techniques, ingénieurs de recherche, d'avant projet, d'essais, d'études produit, de développement
Secteur	62 - Programmation, conseil et autres activités informatiques