

Fiche de poste

Métier ou emploi type* : * REME, REFERENS, BIBLIOPHILE
Fonctions : Chercher ou chercheuse postdoctoral(e)
Catégorie : Corps : BAP (si ITRF) :
<i>Les activités qui composent la fiche de poste sont appelées à évoluer en fonction des connaissances du métier et des nécessités de service.</i>
Présentation de Sorbonne Université
Pour transmettre les connaissances, comprendre le monde et relever les défis du 21 ^e siècle, une nouvelle université est née le 1 ^{er} janvier 2018, issue de la fusion entre les universités Paris-Sorbonne et Pierre et Marie Curie. Sorbonne Université est une université pluridisciplinaire, de recherche intensive et de rang mondial. Ancrée au cœur de Paris, présente en région, elle est engagée pour la réussite de ses étudiants et s'attache à répondre aux enjeux scientifiques du 21 ^e siècle. www.sorbonne-universite.fr
Présentation de la structure (laboratoire, département de formation, service central...)
Description (missions, équipe,...) : L'institut des Sciences du Calcul et des Données (ISCD, https://iscd.sorbonne-universite.fr/) se consacre à l'exploration et au développement d'approches orientées-données et computationnelles pour la recherche à Sorbonne Université, en sciences, en humanités, ou en médecine. Nos équipes de recherche développent et utilisent des algorithmes et des méthodes de visualisation pour résoudre des problèmes en biologie, chimie, mathématiques, informatique, médecine et humanités numériques. L'ISCD a été créé il y a plus de dix ans, pour soutenir les domaines où les méthodes et les moyens d'aborder les défis qui dépassent les disciplines et transforment profondément la recherche. Le ou la candidat(e) fera partie de l'équipe interdisciplinaire MAESTRO, qui inclut chimistes, physiciens, et mathématiciens. Son objectif à long terme est d'étudier les propriétés des matériaux par échantillonnage stochastique et par calcul haute performance.
Localisation : bâtiment Esclangon, Campus Pierre et Marie Curie, 5 place Jussieu, 75005 Paris
Missions et activités principales

Mission (raison d'être du poste) :

Contexte scientifique. Décrire une transformation de la matière – que ce soit une réaction chimique, un processus de nucléation, une transition de phase – nécessite de sélectionner une variable collective (CV), qui représente son avancement. Le choix de CV est crucial, parce qu'il conditionne la valeur estimée des propriétés liées à la transformation étudiée (profil d'énergie libre, taux de transition, etc). L'équipe-projet MAESTRO a développé deux méthodes dans ce domaine : la première permet d'obtenir une équation de Langevin généralisée (GLE) décrivant la dynamique d'une CV, la seconde est centrée sur le classement et l'optimisation de variables collectives à partir d'information sur la fonction de « committor ».

Objectifs scientifiques. L'objectif principal sera d'étudier des phénomènes de nucléation propres à la chimie des batteries (précipitation d'un sel inorganique en solution) ou à la synthèse solvothermale, sous le prisme des deux méthodes mentionnées précédemment. On souhaitera notamment corrélérer les noyaux de mémoire extraits de la GLE à la qualité de la variable collective : on développera une méthode d'optimisation de CV visant à minimiser la quantité de mémoire dans un modèle de Langevin généralisé.

Deux défis importants seront la définition d'un espace de coordonnées ainsi que d'une forme fonctionnelle appropriés pour effectuer l'optimisation de CVs, et la démonstration que la nouvelle approche est capable de récupérer les taux de nucléation précis par rapport à des estimations obtenues par force brute sur des trajectoires de dynamique moléculaire, dans les cas où ces dernières sont accessibles.

Finalement, le ou la candidat(e) pourra appliquer les méthodes qu'il/elle aura développées au problème de la modélisation de l'autoassemblage des matériaux poreux de type Metal-Organic Frameworks (MOFs) dans des conditions solvothermales, qui est l'objet d'étude du projet ERC MAGNIFY dirigé par R. Semino, ou bien à l'étude de phénomènes de transformation/nucléation à l'interface solide-liquide de batteries aqueuses. Dans ce projet, on utilise des CVs pour réaliser des simulations biaisées afin d'étudier la nucléation et la croissance des MOFs en solution de façon efficace, en évitant de rester piégé dans des minima locaux de la surface d'énergie potentielle du système.

Activités principales (10 maximum) :

- Simulations de dynamique moléculaire sur matériaux complexes
- Développement méthodologique et de code
- Rédaction d'articles scientifiques
- Participation à des conférences

Le cas échéant autres activités du poste :

Encadrement : NON

Nb agents encadrés par catégorie : ... A - ... B - ... C

Connaissances et Compétences*

Connaissances transversales requises : physico-chimie et mécanique statistique de la matière condensée

Savoir-faire : simulation moléculaire, modélisation

Savoir-faire transversaux : développement de code

Savoir être (3 maximum) : travail en équipe interdisciplinaire, travail en autonomie



Liberté • Égalité • Fraternité
RÉPUBLIQUE FRANÇAISE



MINISTÈRE
DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE

Conditions particulières d'exercice : /

* Conformément à l'annexe de l'arrêté du 18 mars 2013 (NOR : MENH1305559A)