

Offre de stage postdoctoral

Etude par dynamique moléculaire du comportement mécanique de polymères à l'équilibre et sous choc

Sujet : L'étude du comportement mécanique de polymères par la simulation, à l'ambiante ou sous fortes contraintes, est un problème d'un grand intérêt sur le plan applicatif mais difficile sur le plan méthodologique. En effet les polymères, et les matériaux composites qui en sont constitués, sont des systèmes généralement complexes dont les molécules de grande taille ($M > 5000$ g/mol), la structuration (amorphe, semi-cristallin, polydispersité, réticulation, enchevêtrements, ...) et les temps caractéristiques de réponse représentent un défi pour les approches atomistiques.

Le CEA/DAM développe depuis quelques années des outils de simulation, par dynamique moléculaire notamment, permettant de générer efficacement des polymères de distributions de tailles et d'enchevêtrement réalistes, et de les soumettre à une grande variété de contraintes, représentatives des conditions qu'ils pourront rencontrer au cours de leur mise en forme ou de leur exploitation.

Le but de l'étude proposée est de simuler et modéliser le comportement de systèmes à base de polymères, à l'équilibre et sous contrainte dynamique (chocs notamment). A l'équilibre, on s'attachera à calculer les propriétés élastiques (constantes élastiques, modules de compressibilité et de cisaillement, ...) et thermiques (dilatation) de ces matériaux. Sous contrainte dynamique, on s'intéressera aussi à l'évolution des propriétés structurales des chaînes polymères et à leurs mécanismes de vieillissement (contraintes cycliques). Les processus de décomposition chimique pourront également être abordés par le biais de potentiels réactifs pertinents.

Les systèmes visés sont des homopolymères purs fondus, dans un premier temps. Dans un second temps, une extension vers des systèmes complexes (mélanges, copolymères, systèmes interfaciaux polymère/solide) est souhaitable.

Collaboration : Ce postdoctorat est proposé dans le cadre du projet SMICE (Simulation de Matériaux pour l'Industrie par Calcul Exaflop) qui regroupe entre autres le CEA, Michelin et L'Oréal.

Centre de calcul : Les simulations seront menées sur le centre de calcul très performant du CEA.

Candidat : Le candidat devra posséder de solides connaissances en chimie-physique, notamment en physique statistique, idéalement dans le domaine des polymères. Une expérience en simulation atomistique (dynamique moléculaire, Monte Carlo) est requise et un goût prononcé pour la programmation informatique (C, C++) serait un plus.

Lieu de travail : CEA/DAM/DIF, Bruyères-le-Châtel

Durée du contrat : 1 an renouvelable une fois pour un an

Salaire net : à partir de 2200€, en fonction du cursus du candidat

Contacts : claire.lemarchand@cea.fr, nicolas.pineau@cea.fr
(fournir un CV et une lettre de motivation)