

Proposition de stage post-doctoral pour 2015

au CEA-DAM Ile-de-France

**Réactivité d'un matériau énergétique granulaire :
application à la formation de nanodiamants de détonation**

La réactivité d'un matériau énergétique solide traversé par une onde choc ou de détonation peut dépendre intimement de sa structure intime, notamment de sa granularité (distribution en taille des grains constituant l'explosif). Dans le cas des explosifs sous-oxygénés, des travaux expérimentaux récents menés à l'Institut Saint-Louis (ISL) indiquent une dépendance monotone croissante entre la taille moyenne des grains et le diamètre moyens des agrégats de diamant synthétisés au cours du processus de détonation.

Du fait de la complexité et du coût des moyens expérimentaux et numériques à mettre en œuvre pour aborder ce type de problème, il n'existe à l'heure actuelle aucun modèle permettant de rendre compte de cette dépendance. Pourtant les applications, tant fondamentales (compréhension et modélisation de la propagation d'une onde de détonation dans un matériau granulaire) qu'appliquées (médicales, propulsion, capteurs/détecteurs, imagerie, optronique), sont nombreuses et prometteuses.

Le CEA/DAM/DIF et l'ISL ont lancé une collaboration théorie/expérience visant à déterminer les paramètres responsables de la dépendance entre nano/micro granularité et tailles de nanodiamants. Ce projet fait l'objet d'un financement ASTRID accordé par l'ANR en 2014 (projet ATOLE).

Cette offre de contrat post-doctoral correspond au volet théorie de cette étude et vise à comprendre, par la simulation atomistique, l'impact de la nano/micro structure d'un matériau sur ses propriétés réactives. A partir de ces résultats, des modèles de comportement seront établis permettant une utilisation directe par l'expérimentateur ou dans le cadre de simulations multi-échelles.

L'ensemble de ces travaux seront menés en collaboration étroite avec la composante expérimentale de l'étude, menée conjointement par l'ISL.

Le candidat bénéficiera des moyens et des outils de calcul de la DAM (supercalculateur pétaflopique TERA100, codes de simulation massivement parallèles). En plus de la conception et du suivi de simulations pertinentes via les codes actuels développés au CEA/DAM/DIF, il pourra participer au développement des codes maison et concevoir ses propres outils d'analyse.

Le candidat devra disposer de solides connaissances en physique des matériaux et en simulation atomistique. Une expérience de la programmation en environnement parallèle serait un plus.

Le candidat sera basé au CEA/DAM Île-de-France (40 km au sud de Paris). Il sera amené à se déplacer périodiquement à l'ISL dans le cadre de l'ANR ATOLE, et à l'étranger dans le cadre de congrès internationaux.

Durée du contrat : 18 mois.

Salaire de l'ordre de 2000 €/mois net.

Les candidatures (CV et lettre de motivation) sont à faire parvenir à :

Nicolas PINEAU
CEA-DAM Ile-de-France,
F-91297 Arpajon Cedex, France.
e_mail : nicolas.pineau@cea.fr