

N° emploi : 33MCF200

Physico-chimie des matériaux / Materials chemistry

## ARGUMENTAIRES

### Enseignement

La personne recrutée participera aux enseignements de chimie de l'UFR des Sciences à tous les niveaux (du L1 au M2), avec une prédominance pour les enseignements de chimie du solide et des matériaux. Elle devra tout particulièrement apporter ses compétences au travers de cours, TD et TP dans les modules des filières listées ci-dessous, en fonction du profil de la personne recrutée :

- En Licence de Chimie, dans le cadre de l'enseignement de la thermodynamique, de la structure et de la chimie des solides.
- Au Master Sciences et Génie des Matériaux et au Master Chimie, dans le cadre de l'enseignement de la physico-chimie des oxydes cristallins, de la synthèse à la caractérisation de leurs propriétés structurale et physiques.
- Au Master Sciences et Génie des Matériaux, dans le cadre d'enseignements en lien avec les simulations numériques à l'échelle atomique (dynamique moléculaire et Monte Carlo).

La personne recrutée aura pour mission de s'intégrer et de participer aux équipes pédagogiques d'enseignement de la chimie du solide et des matériaux et de poursuivre le développement d'approches pédagogiques permettant de faciliter l'apprentissage à un public étudiant aux profils variés (notamment au travers de TP ou TD informatisés et de ressources pédagogiques accessibles sur le Moodle ECampus de l'établissement). La motivation du candidat concernant la qualité de la formation dispensée et le développement de l'innovation pédagogique sera prise en compte.

### Recherche

La personne recrutée devra proposer un projet de recherche en adéquation avec les thématiques de l'un des deux laboratoires d'accueil (ICMMO ou IJCLab).

#### **ICMMO : Design d'oxydes fonctionnels : approches théoriques ou expérimentales**

La personne recrutée intégrera l'équipe Synthèse, Propriétés et Modélisation des Matériaux (ESP2M, 30 permanents), qui aborde différents aspects de la chimie des matériaux, principalement orientés vers la physico-chimie, la thermodynamique et les cinétiques de l'organisation de la matière (oxydes et alliages métalliques) à plusieurs échelles ainsi qu'à l'étude des propriétés résultant de cette organisation, avec des approches à la fois théoriques et expérimentales. Elle devra avoir une expertise reconnue en théorie ou en expérimentation des oxydes fonctionnels et elle devra renforcer le lien entre ces deux aspects, dont les principales activités sont :

- Expérimentalement, le développement et l'étude des propriétés de nouveaux matériaux fonctionnels et multifonctionnels. L'expertise de l'équipe va de la synthèse de monocristaux de tailles centimétriques à la synthèse de couches minces nanométriques en passant par la modification structurale des matériaux. Les propriétés étudiées dans l'équipe incluent principalement les propriétés magnétiques, électroniques et thermiques, ainsi que leur couplage.
- Théoriquement, des études fondamentales à la fois génériques pour développer des outils théoriques et numériques à l'échelle atomique afin d'accroître la compréhension fine de la physico-chimie à l'état solide et ciblées en lien étroit avec des activités expérimentales. L'équipe possède une expertise dans le développement de potentiels interatomiques réalistes pour les simulations moléculaires classiques ainsi que dans l'emploi de techniques *ab initio* pour la simulation de propriétés électroniques et de spectres Infra-Rouge des oxydes.

Le développement de ces axes de recherche avec un couplage plus fort entre théorie et expérience est souhaité afin de progresser dans l'étude des propriétés physiques de ces matériaux, par une démarche visant à

comprendre les effets de la dimensionnalité, de la stoechiométrie et/ou de la microstructure, puis de maîtriser les conditions d'élaboration ou de traitement de manière à optimiser les propriétés ciblées, voire à les créer. Concernant plus particulièrement les activités théoriques, ESP2M souhaite acquérir une expertise en design des matériaux avec le développement de bases et d'outils de criblages de données, tout en étendant son expertise en calculs *ab initio* à l'étude des effets de dimensionnalité et des défauts sur les propriétés de transport.

### **IJCLab : Simulations numériques associées aux problématiques de l'énergie nucléaire**

La personne recrutée effectuera son activité de recherche dans le Pôle *énergie & environnement* du nouveau laboratoire IJCLab créé en janvier 2020 et constitué de 23 permanents. Elle viendra renforcer les activités de l'axe transverse, *simulations numériques*. La simulation numérique est aujourd'hui un complément indispensable aux études expérimentales menées dans le pôle dans le domaine de l'énergie nucléaire. Plus particulièrement, le ou la candidate devra présenter un projet de recherche en lien avec une ou plusieurs thématiques développées dans le pôle afin d'apporter son expertise théorique pour aider à la compréhension et à l'interprétation des résultats expérimentaux. Les différents axes principaux de recherche concernés sont :

- la migration (diffusion) des radioéléments dans les solides, aux interfaces solide/solide et solide/liquide. (métaux, alliages et oxydes métalliques) ;
- le comportement des gaz rares dans les nouveaux matériaux pour le nucléaire et/ou dans les minéraux ;
- la complexation des actinides/radioéléments en solution.

L'ensemble de ces axes de recherche constitue un enjeu majeur dans le domaine de l'énergie nucléaire et la simulation numérique est aujourd'hui une alliée indispensable afin d'avoir une bonne compréhension des mécanismes. Afin de mener à bien ces études, une bonne maîtrise des techniques de simulation numérique comme la DFT (localisée ou périodique), la dynamique moléculaire classique et/ou quantique ainsi que les méthodes du type Monte Carlo sera fortement appréciée.

**Mots-clefs ICMMO** : oxydes métalliques, synthèse de monocristaux, synthèse de couches minces, caractérisation expérimentale des propriétés (multi)fonctionnelles, diagrammes de phases, propriétés spectroscopiques vibrationnelles, influence des défauts ponctuels et étendus, calcul des propriétés de transport (électronique et thermique), design in silico de matériaux (multi)fonctionnels.

**Mots-clefs IJCLab** : Simulations numériques, matériaux pour le nucléaire, oxydes et alliages métalliques, minéraux, diffusion, défauts, complexation des actinides, radioéléments, gaz rares

## **JOB DESCRIPTION**

### **Teaching**

The recruited person will participate in chemistry lessons at the UFR des sciences at all levels (from L1 to M2), with a predominance for lessons in solid-state chemistry and materials. She/S

he will have to bring her/his skills in particular through courses, tutorials and practical work in the modules of the sectors listed below, depending on the profile of recruited the person:

- In the Bachelor in Chemistry, as part of the teaching of thermodynamics, structure and chemistry of solids.
- In the Master in Materials Science and Engineering and in the Master in Chemistry, as part of the teaching of the chemical physics of crystalline oxides, from synthesis to the characterization of their structural and physical properties.
- In the Master in Materials Science and Engineering, as part of teaching related to numerical simulations at the atomic scale (molecular dynamics and Monte Carlo).

The recruited person will have for mission to integrate and participate in the teaching teams of solids and materials chemistry and to continue the development of teaching approaches making it possible to facilitate the learning to a student public with various profiles (in particular through computerized practical work or tutorials and educational resources accessible on the establishment's Moodle ECampus). The candidate's motivation regarding the quality of the training provided and the development of educational innovation will be taken into account.

### **Research activities**

The recruited person must propose a research project in line with the themes of one of the two host

laboratories (ICMMO or IJCLab).

**ICMMO: Design of functional oxides: theoretical or experimental approaches**

The recruited person will join the Synthesis, Properties and Modeling of Materials team (ESP2M, 30 permanent staff), which addresses various aspects of materials chemistry, mainly oriented towards chemical physics, thermodynamics and kinetics of the organization of matter (oxides and metal alloys) at several scales as well as the study of the properties resulting from this organization, with both theoretical and experimental approaches. She/He must have recognized expertise in theory or in experimentation with functional oxides and she must strengthen the link between these two aspects, the main activities of which are:

- Experimentally, the development and study of the properties of new functional and multifunctional materials. The team's expertise ranges from the synthesis of centimeter-sized single crystals to the synthesis of nanometer-sized thin films, including the structural modification of materials. The properties studied in the team mainly include magnetic, electronic and thermal properties, as well as their coupling.
- Theoretically, both generic fundamental studies to develop theoretical and numerical tools at the atomic scale in order to increase the fine understanding of solid-state physical chemistry and targeted studies in close connection with experimental activities. The team has expertise in the development of realistic interatomic potentials for classical molecular simulations as well as in the use of ab initio techniques for the simulation of electronic properties and infrared spectra of oxides.

The development of these lines of research with a stronger coupling between theory and experiments is desired in order to progress in the study of the physical properties of these materials, by an approach aimed at understanding the effects of dimensionality, stoichiometry and/or of the microstructure, then to control the production or treatment conditions so as to optimize the targeted properties, or even to create them. Concerning more particularly theoretical activities, ESP2M wishes to acquire expertise in materials design with the development of databases and data screening tools, while extending its expertise in ab initio calculations to the study of the effects of dimensionality and defects on transport properties.

**IJCLab: Numerical simulations associated with nuclear energy issues**

The recruited person will carry out her/his research activity in the Energy & Environment Pole of the new IJCLab laboratory created in January 2020 and made up of 23 permanent staff. It will strengthen the activities of the transverse axis, numerical simulations. Today numerical simulation is an essential complement to the experimental studies carried out in the pole in the field of nuclear energy. More specifically, the candidate will have to present a research project related to one or more themes developed in the pole in order to bring her or his theoretical expertise to help the understanding and interpretation of the experimental results. The various main areas of research concerned are:

- migration (diffusion) of radioelements in solids, at solid/solid and solid/liquid interfaces. (metals, alloys and metal oxides);
- the behavior of rare gases in new materials for nuclear power and/or in minerals;
- complexation of actinides/radioelements in solution.

All of these research topics constitute a major stake in the field of nuclear energy and numerical simulation is today an essential ally in order to have a good understanding of the mechanisms. In order to successfully carry out these studies, a good mastery of numerical simulation techniques such as DFT (localized or periodic), classical and/or quantum molecular dynamics as well as Monte Carlo type methods will be highly appreciated.

**ICMMO keywords:** metal oxides, synthesis of single crystals, synthesis of thin films, experimental characterization of (multi)functional properties, phase diagrams, vibrational spectroscopic properties, influence of defects, calculation of transport properties (electronic and thermal), in silico design of (multi)functional materials.

**IJCLab keywords:** Numerical simulations, materials for nuclear energy, metal oxides and alloys, minerals, diffusion, defects, complexation of actinides, radioelements, noble gases

Laboratoire(s) d'accueil : (sigle et intitulé détaillé) **ICMMO** Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay , **IJCLAB** Laboratoire de physique des 2 infinis Irène Joliot-Curie

Label (UMR, EA, ...)	N°	Nbre de chercheurs	Nbre d'enseignants-chercheurs
UMR ICMMO	8182	22	78
UMR IJCLab	9012	55	138

## CONTACTS

**Enseignement** : [sophie.bezenine@universite-paris-saclay.fr](mailto:sophie.bezenine@universite-paris-saclay.fr), [gael.sattonnay@universite-paris-saclay.fr](mailto:gael.sattonnay@universite-paris-saclay.fr), [jerome.roques@universite-paris-saclay.fr](mailto:jerome.roques@universite-paris-saclay.fr), [jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr](mailto:jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr)

**Recherche** : ICMMO : [jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr](mailto:jerome.creuze@universite-paris-saclay.fr), [nita.dragoe@universite-paris-saclay.fr](mailto:nita.dragoe@universite-paris-saclay.fr), IJCLab : [frederico.garrido@universite-paris-saclay.fr](mailto:frederico.garrido@universite-paris-saclay.fr), [jerome.roques@universite-paris-saclay.fr](mailto:jerome.roques@universite-paris-saclay.fr)

*L'Université Paris-Saclay est l'une des meilleures universités françaises et européennes, à la fois par la qualité de son offre de formation et de son corps enseignant, par la visibilité et la reconnaissance internationale de ses 275 laboratoires de recherche et leurs équipes, ainsi que par l'attention apportée, au quotidien et par tous ses personnels, à l'accueil, l'accompagnement, l'interculturalité et l'épanouissement de ses 65 000 étudiants. L'université Paris-Saclay est constituée de 10 composantes universitaires, de 4 grandes écoles (Agroparistech, CentraleSupélec, Institut d'Optique Graduate School, Ens Paris-Saclay), d'un prestigieux institut de mathématiques (Institut des Hautes Études Scientifiques) et s'appuie sur 6 des plus puissants organismes de recherche français (CEA, CNRS, Inra, Inria, Inserm et Onera). Elle est associée à deux universités (Université de Versailles Saint-Quentin-en-Yvelines et Université d'Évry Val-d'Essonne) qui fusionneront dans les années à venir et dont les campus jouxtent le territoire du plateau de Saclay et de sa vallée. Ses étudiants, ses enseignants-chercheurs, ses personnels administratifs et techniques et ses partenaires évoluent dans un environnement privilégié, à quelques kilomètres de Paris, où se développent toutes les sciences, les technologies les plus en pointe, l'excellence académique, l'agriculture, le patrimoine historique et un dynamique tissu économique. Ainsi l'Université Paris-Saclay est un établissement de premier plan implanté sur un vaste territoire où il fait bon étudier, vivre et travailler.*

Site : <https://www.universite-paris-saclay.fr/fr>

**Candidature via l'application GALAXIE :**

<https://galaxie.enseignementsup-recherche.gouv.fr/antares/can/astree/index.jsp>