

Offre de thèse

Modélisation atomistique de liquides ioniques confinés

Mots clés : liquide ionique, modélisation de liquides confinés, mécanique moléculaire, mécanique quantique, stockage de l'énergie, dynamique moléculaire (ab-initio), science des matériaux, théorie de la fonctionnelle de la densité, deep learning

début : septembre / octobre 2022 (3 ans)

localisation : [Institut des Matériaux de Nantes Jean Rouxel \(IMN\)](#) / [Nantes Université](#), France.

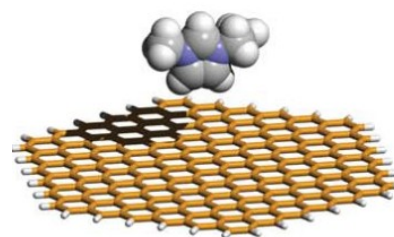
Équipe / thématique : [Physique des matériaux et nanostructures](#) / [liquides ioniques confinés, ionogels](#)

financement : [École doctorale 3M](#)

directeur : Jean Le Bideau

superviseur : Yann Claveau

co-superviseur : Chris Ewels



[RSC Adv., 2014, 4, 18017](#)

Contexte

Ce sujet de thèse s'inscrit dans le développement de la nouvelle thématique : **modélisation moléculaire et quantique de liquides ioniques confinés**. Elle sera co-encadrée par [Yann Claveau](#), nouvel enseignant-chercheur arrivé en 2021 dans l'équipe PMN, et porteur de la thématique modélisation et dirigée par [Jean Le Bideau](#) (responsable de l'activité liquides ioniques à l'IMN).

Les liquides ioniques présentent des propriétés très intéressantes pour de nombreux domaines tels que la **iontronique**, la **catalyse**, les **dispositifs pour la santé ou le stockage de l'énergie**. Contre-intuitivement, confiner un liquide ionique dans une matrice hôte (un procédé en cours de développement pour les batteries "tout-solide") peut améliorer significativement sa **conductivité ionique**. Le mécanisme responsable de cet effet reste encore mal compris.

Ce doctorat vise à comprendre les **mécanismes physico-chimiques sous-jacents aux interfaces hôte / liquide ionique en utilisant des simulations multi-modèles** (mécanique

quantique / mécanique moléculaire) **multi-échelles** (de l'Å au µm, de la ps à la µs) dans le but de développer des électrolytes sous forme d'ionogels ayant une conductivité ionique optimale.

Le problème sera attaqué sous deux angles complémentaires : la **modélisation**, pour comprendre, et le **deep learning** pour produire des données.

Profil attendu

- Une culture excellente dans la physique des matériaux / chimie-physique / les nanosciences (classé dans le 1^{er} tiers de son Master)
- De l'expérience en modélisation est un fort avantage : MD (LAMMPS) ou DFT.
- De l'expérience en programmation (Python, Fortran, C etc.)
- Curieux et un fort goût pour l'exploration, préférant essayer et se tromper plutôt que suivre un chemin tracé.
- Anglais courant, parlé et écrit.
- Une bonne capacité à travailler en équipe, avec d'autres théoriciens ou expérimentateurs, et l'envie de collaborer avec des étudiants sur des projets liés.

Merci d'envoyer à yann.claveau@cnrs-immn.fr avant le 11 juillet, une lettre, expliquant pourquoi ce sujet vous intéresse, accompagnée d'un CV détaillé et d'un relevé de note incluant le classement. Les lettres standardisées ne seront pas prises en compte. Aucune restriction de nationalité et nous assurons l'égalité des chances pour tou·te·s.