

CHERCHEUR (H/F) EN MODELISATION DE PARAMETRES RMN PAR DFT

INFORMATIONS GENERALES

Référence : UPR3079-MICDES-004
Nombre de Postes : 1
Lieu de travail : ORLEANS
Date de publication : jeudi 1 août 2024
Type de contrat : CDD Scientifique
Durée du contrat : 12 mois
Date d'embauche prévue : 1 novembre 2024
Quotité de travail : Temps complet
Rémunération : Rémunération comprise entre 2991 € et 4345 € bruts mensuels selon expérience
Niveau d'études souhaité : Niveau 8 - (Doctorat)
Expérience souhaitée : 1 à 4 années
Section(s) CN : Chimie des matériaux, nanomatériaux et procédés

MISSIONS

Au CNRS, au laboratoire CEMHTI (Conditions Extrêmes et Matériaux : Haute Température et Irradiation) à Orléans, l'équipe MATRMAG - "MATériaux et Résonance MAGnétique" du laboratoire CEMHTI-CNRS (UPR 3079) recrute un(e) chercheur(se).

Dans le cadre du projet européen ULTRABAT (BATTERY2030+), le post-doctorant sera chargé de réaliser la modélisation des paramètres RMN des ions lithium dans et à l'interface des matériaux de cathode de batteries.

Le projet ULTRABAT s'intéresse au transfert de charges ioniques et électroniques à l'interface des matériaux, qui sont à l'origine de nombreuses limitations et processus de dégradation des batteries. L'objectif est de caractériser l'état de l'interface, la mobilité du lithium et des charges électroniques à ce niveau, en utilisant des matériaux avec une morphologie et un état de surface contrôlés, grâce à des techniques d'échange isotopique et/ou de corrélations homo/hétéronucléaires. Cette étude se fera en collaboration avec des spécialistes de microscopie, des méthodes RX et optiques, et de modélisation (DFT/dynamique moléculaire).

ACTIVITES

- Modélisation des paramètres RMN des matériaux de cathode de batterie lithium sélectionnés dans le cadre du projet ULTRABAT.
- Modélisation de l'interface et des paramètres RMN locaux en collaboration avec le

groupe de modélisateurs de DTU (Danemark).

- Réalisation éventuelle d'expériences de RMN sur les matériaux étudiés.
- Traitement et interprétation des données.
- Valorisation des résultats par des publications et participation à des congrès.
- Rédaction de rapports, documents techniques et publications scientifiques.

COMPETENCES

- Modélisation de matériaux par DFT et calcul de paramètres RMN.
- Expérience de la RMN expérimentale.
- Notions d'électrochimie, de propriétés magnétiques et électroniques, et de chimie du solide.
- Maîtrise des outils informatiques nécessaires au pilotage des appareils et aux traitements et analyses des données.
- Respect des règles d'hygiène et de sécurité liées au domaine.

CONTEXTE DE TRAVAIL

Le CEMHTI est un laboratoire propre du CNRS (environ 100 personnes) et abrite une plateforme de RMN comprenant 6 spectromètres (de 200 à 850 MHz) et un ensemble varié de sondes MAS (de 7 à 0,7 mm) ou statiques pour l'imagerie ou la diffusion, appartenant aux plateformes nationales INFRANALYTICS ou RS2E.

Le projet européen ULTRABAT (5 M€) réunit un consortium comprenant la DTU (Danemark), l'Eu-XFEL (Allemagne), le CNRS et le Collège de France, et participe à l'initiative européenne BATTERY 2030+. Le contrat est renouvelable jusqu'à 30 mois.

Le/La chercheur(se) sera basé(e) sur le site haute température du laboratoire où il/elle intégrera l'équipe "MATériaux et Résonance MAGnétique".

Date limite de candidature fixée au 15/09/2024

CONTRAINTE ET RISQUES

Participation aux événements organisés par le consortium ULTRABAT (réunions biennuelles) ainsi qu'à la production des livrables du projet européen.

POUR POSTULER