

Calcul de structure électronique avec des modèles d'apprentissage profond



Description de l'offre

L'évolution de l'intelligence artificielle a permis la création de modèles de potentiels interatomiques avancés grâce à l'apprentissage profond, accélérant ainsi la modélisation des matériaux à l'échelle atomique. Cette thèse vise à étendre cette méthode pour prédire non seulement la surface d'énergie potentielle mais également la structure électronique des matériaux. Un tel progrès transformerait radicalement les simulations quantiques de matériaux, en facilitant l'étude des propriétés physiques de systèmes de grande taille (jusqu'à plusieurs milliers d'atomes) dans le domaine de la microélectronique.

En intégrant l'équipe de simulation avancée du CEA-Leti, vous élaborerez de nouvelles méthodologies qui intègrent l'intelligence artificielle pour modéliser les matériaux au niveau microscopique. Vous disposerez de supercalculateurs pour valider vos modèles. Vous diffuserez vos résultats à travers des publications dans des journaux scientifiques et des présentations lors de conférences internationales.

Durant votre thèse, vous aurez l'occasion d'approfondir vos compétences en intelligence artificielle, notamment dans le domaine du *deep learning* géométrique (réseaux de neurones sur graphes). Vous élargirez également votre savoir-faire en modélisation de matériaux à l'échelle atomique.

Profil du candidat

Formé dans le domaine de la physique des matériaux, de la physique numérique ou des mathématiques appliquées, vous connaissez les techniques de *deep learning* et vous souhaitez développer vos compétences à la frontière entre la simulation numérique et l'intelligence artificielle. Vous savez alterner travail en autonomie et travail collaboratif afin d'apporter de nouvelles compétences à l'équipe.

Simulations numériques
Deep learning
Science des matériaux

Application & impact sociétal

- ▶ Simulation plus performante pour l'exploration des effets quantiques des matériaux.

Pour aller plus loin

Simuler les propriétés quantiques sur la base de l'IA



Pour postuler, envoyez votre candidature à l'adresse :

benoit.sklenard@cea.fr