

Campagne d'emplois des enseignants-chercheurs - Rentrée 2021
Session synchronisée

Type de poste :	Enseignant-Chercheur
Identification du poste :	Section 30 / MCF -N°GALAXIE (champ renseigné par la DRH)
Intitulé :	Modélisation quantique/classique aux interfaces
Nature du concours :	Article de recrutement (26 1°...)
Composante - Département :	IUTA – Département Mesures Physiques
Unité de recherche :	PhLAM – UMR CNRS 8523

Enseignement :

Filières de formation concernées :

Le candidat ou la candidate recruté.e effectuera son enseignement dans la formation de DUT Mesures Physiques de l'IUT A de Lille. Il ou elle viendra renforcer l'équipe pédagogique en intervenant notamment dans les enseignements de première et deuxième années dans des différents domaines tels que: optique, mécanique, thermique, métrologie, informatique et algorithmique.

Les enseignements seront à dominante expérimentale (travaux pratiques). Des interventions en Licence professionnelle seront possibles.

Objectifs pédagogiques :

Le candidat ou la candidate recruté.e aura en charge des Unités d'Enseignement (UE) (TP et/ou TD) et contribuera à l'élaboration des nouveaux enseignements théoriques et expérimentaux liés à la mise en place du BUT (Bachelor Universitaire de Technologie).

Il ou elle participera à la vie du Département (pré-jury, conseils de département, réunions pédagogiques...) et une prise de responsabilités sera demandée (UE, direction d'études...)

Besoin d'encadrement :

Le candidat ou la candidate recruté.e participera au suivi de stage de fin d'études et s'investira dans les projets tuteurés (encadrement de 3 à 4 projets par an souhaité).

Recherche :

Thématique de recherche :

Le laboratoire PhLAM (<http://www.phlam.univ-lille.fr>) a une activité de recherche en Physique Moléculaire. L'équipe Physico-Chimie Moléculaire Théorique (PCMT) développe une activité interdisciplinaire avec pour axe majeur le développement et l'application d'approches quantiques, classiques et mixtes quantiques/classiques afin d'étudier les propriétés physico-chimiques de systèmes complexes d'intérêt atmosphérique et astrophysique, et notamment celles rencontrées aussi bien aux interfaces de complexes nanoscopiques de type agrégats, aérosols et suies qu'aux interfaces de surfaces de glace. Cette thématique est au cœur des activités du Labex CaPPA, du CPER CLIMIBIO et du projet pilote I-SITE OVERSEE. À l'échelle nationale, elle contribue activement à différentes actions sur projet du CNRS (Programme Nation

Physique Chimie du Milieu Interstellaire), est financée par projets nationaux (ANR), et permet de nouer de nombreuses collaborations européennes.

Le PhLAM souhaite renforcer cet axe majeur, en recrutant un(e) Maître de Conférences dont les travaux de recherche sont reconnus aussi bien au niveau national qu'international. La/le candidat(e) justifiera d'une expérience doctorale et postdoctorale dans le domaine de la modélisation théorique physico-chimique. Sa mission sera d'apporter de nouvelles compétences à l'équipe PCMT, et de développer et animer un thème de recherche parmi les suivants, au meilleur état de l'art, afin d'étudier les mécanismes de physisorption, de chimisorption et de photoréactivité au cœur des propriétés et de la réactivité des agrégats, aérosols, surfaces et interfaces et/ou solides :

- Développement et/ou applications de méthodes de type structure électronique moléculaire (DFT, DFT+U, CC, DMRG/CASSCF+MBPT2, embedding,...) ou périodique (CP2K, CPMD, VASP, Quantum Espresso)
- Développement et application d'approches multiméthodes QM/MM ou QM/QM' ou d'embedding pour traiter la réactivité de systèmes environnés ou aux interfaces
- Développement et/ou applications de méthodes de champs de force réactifs (de type REAXFF), ces derniers étant capables de prédire à la fois les propriétés physico-chimiques et la réactivité de structures chimiques complexes.
- Développement de méthodes d'exploration efficaces de paysages énergétiques pour des systèmes étendus.
- Développements possibles de nouveaux modèles et d'analyse des données des simulations basées sur les approches « Machine Learning », « réseau neuronal ».

Prises de responsabilités attendues :

Investissement dans les nombreux projets en cours du Labex CaPPA, du CPER CLIMIBIO, et de l'ISTILNE (Hub 2). Réponse aux appels à projets nationaux (ANR, etc.) et Européens (ERC).

Innovation pédagogique :

Une sensibilisation à l'approche par compétence est demandée

Mots-clés : (ATTENTION : respecter la liste des mots clés jointe)

- Moléculaire ;
- Quantique ;
- Physique atomique;
- Nanoparticules;
- Agrégats;

Champs Euraxess :

Job Title : Quantum/classical modeling at interfaces

Job Profile :

The PhLAM laboratory (<http://www.phlam.univ-lille.fr>) has a research activity in Molecular Physics. The Theoretical Molecular Physico-Chemistry team (PCMT) develops an interdisciplinary activity with a major focus on the development and application of quantum, classical and mixed quantum/classical approaches

in order to study the physico-chemical properties of complex systems of atmospheric and astrophysical interests, and in particular those encountered at the interfaces of complex nanoscopic aggregates, aerosols and soot as well as at the ice surfaces. This theme is at the heart of the activities of the Labex CaPPA, the CPER CLIMIBIO and the cluster project I-SITE OVERSEE. On a national scale, it actively contributes to various actions on CNRS projects (National Program on Physics and Chemistry of the Interstellar Medium), is financed by national projects (ANR), and allows the establishment of European collaborations.

The PhLAM wishes to reinforce this major axis, by recruiting an Associate Professor whose research work is recognized both nationally and internationally. The candidate will have a doctoral and postdoctoral experience in the field of theoretical physico-chemical modeling. His/her mission will be to bring new skills to the PCMT team, and to develop and animate one of the following themes, at the best state of the art, in order to study the mechanisms of physisorption, chemisorption and photoreactivity at the heart of the properties and reactivity of aggregates, aerosols, interfaces and/or soot :

- Development and/or applications of molecular electronic structure methods (DFT, DFTB, CC, DMRG/CASSCF+MBPT2, embedding,...) or periodic methods (CP2K, CPMD, VASP, Quantum Espresso).
- Development and application of multi-method QM/MM or QM/QM' or embedding approaches to deal with the reactivity of surrounded systems or at interfaces
- Development and/or applications of reactive force field methods (such as REAXFF), the latter being able to predict both the physico-chemical properties and the reactivity of complex chemical structures.
- Development of efficient energy landscape exploration methods for large systems.
- Possible development of new models and analysis of simulation data based on "Machine Learning" and "neural network" approaches.

Research fields : (ATTENTION : respecter la liste jointe)

Physics : Chemical physics, Classical mechanics, Computational physics, Surface physics, Quantum mechanics

Chemistry: Physical chemistry

Contacts :

Recherche :	<p>Prénom – NOM - Fonction : Céline Toubin/ Valérie Vallet (responsables de l'équipe PCMT)</p> <p>Téléphone : +33 (0)3 20 43 43 80 / +33 (0)3 20 33 59 85</p> <p>Courriel : celine.toubin@univ-lille.fr / valerie.vallet@univ-lille.fr</p> <p>Site internet : https://phlam.univ-lille.fr/recherche/pcmt/</p>
Enseignement :	<p>Prénom – NOM- Fonction : Sylvie Magnier (Chef du Département Mesures Physiques)</p> <p>Téléphone : +33 (0)3 59 63 22 53</p> <p>Courriel : sylvie.magnier@univ-lille.fr</p> <p>Site internet :</p>
Administratif :	<p>Bureau recrutement-mobilité enseignants</p> <p>Téléphone : +33 (0)3 62 26 95 39 / +33 (0)3 62 26 95 47 / +33 (0)3 62 26 95 38</p> <p>Courriel : recrutement-mobilite-enseignants@univ-lille.fr</p> <p>Site internet : https://www.univ-lille.fr/universite/travailler-a-luniversite/</p>

IMPORTANT :

- Le poste sur lequel vous candidatez est susceptible d'être situé dans une « zone à régime restrictif » au sens de l'article R. 413-5-1 du code pénal. Si tel est le cas, votre nomination et/ou votre affectation ne pourront intervenir qu'après autorisation d'accès délivrée par le chef d'établissement, conformément aux dispositions de l'article 20-4 du décret n°84-431 du 6 juin 1984 ;
- Ce poste est ouvert aux personnes en situation de handicap ;
- La composition du comité de sélection sera accessible sur le site de l'Université de Lille à la rubrique : <https://www.univ-lille.fr/universite/travailler-a-luniversite/> dès la publication des postes sur l'application ministérielle GALAXIE.