

**NB : tout dossier incomplet à la date de fermeture des candidatures sera déclaré irrecevable. Nous conseillons donc - considérant le grand nombre de candidatures à traiter - de ne pas attendre les derniers jours pour déposer votre dossier, afin de permettre son complément si besoin**

## Poste à pourvoir

**Type de contrat :** CDD LRU enseignant-chercheur au titre de l'article L954-3 du code de l'éducation

**Quotité de temps de travail :** 100%

**Collège/Institut/Ecole de rattachement :** Collège Sciences et Technologies (ST)

**Unité de formation :** Chimie

**Département de recherche :** Sciences de la Matière et du Rayonnement (SMR)

**Laboratoire :** UMR 5255 ISM / Équipe Chimie Théorique et Modélisation (THEO)

**Section CNU ou discipline :** 31

**Intitulé du profil :** Chimie théorique

**Durée du contrat proposé :** 1 an

**Date de début du contrat :** 01/09/2025

**Rémunération proposée :** INM 479 soit une rémunération mensuelle brute de 2 358,01 €.

## Profil enseignement

**Volume horaire d'enseignement sur la durée du contrat :** 128 HETD/an.

**Filières de formation concernées :** Licence de Chimie, Licence Physique Chimie, Master de Chimie, Licences Professionnelles de Chimie.

**Matières enseignées :** Chimie théorique, Chimie Physiques, Chimie Générale.

**Objectifs pédagogiques :** La personne recrutée aura un profil d'enseignement principalement axé sur la chimie théorique, la physicochimie, et la chimie générale, complété par des compétences en intelligence artificielle (IA) appliquée aux domaines de la chimie. Elle assurera son enseignement principalement au niveau de la Licence, mais pourra également intervenir au niveau du Master mention Chimie de l'Université de Bordeaux.

La personne participera très activement aux réflexions des équipes pédagogiques, dont les objectifs principaux sont le développement de l'autonomie, de l'adaptabilité et de la réflexion scientifique de nos étudiants. Elle devra s'inscrire dans l'un (ou plusieurs) des axes stratégiques définis par l'université de Bordeaux : réussite des étudiants, innovations pédagogiques, internationalisation, formation tout au long de la vie, enseignement à distance, prise en compte de la diversité du public et interdisciplinarité.

Dans ce cadre, nous recherchons une candidate ou un candidat dont les compétences en termes d'enseignement interdisciplinaire entre la chimie et l'IA sont avérées. La capacité à enseigner en anglais est aussi un prérequis, notamment dans le cadre du développement de cursus internationaux, dès la licence. Les enseignements concerneront principalement des TD et des TP de la première année de Licence jusqu'en seconde année de Master.

## Profil recherche

L'étude de la dynamique des réactions aux interfaces gaz-solide est cruciale pour de nombreux domaines, notamment la chimie hétérogène atmosphérique et interstellaire, ainsi que les interactions plasma-paroi dans la fusion thermonucléaire. Comprendre les mécanismes moléculaires d'adsorption, de chimisorption et de réactivité hétérogène à ces interfaces apporte des connaissances fondamentales essentielles aux avancées technologiques dans ces domaines. Le projet recherche vise à développer un cadre informatique complet pour l'étude des interactions gaz-surface en utilisant des méthodologies basées sur l'Intelligence Artificielle (IA). En intégrant la Dynamique Moléculaire Ab Initio (AIMD) avec Potentiels d'Interaction réactifs construits à l'aide de l'Apprentissage Automatique (MLIP), le projet consistera à améliorer la précision et l'efficacité computationnelle des simulations de dynamique moléculaire, permettant ainsi des investigations plus détaillées des mécanismes de réactivité, de transfert d'énergie et de dissipation dans des systèmes complexes de haute dimensionnalité.

Pour atteindre cet objectif, différents modèles basés sur l'IA pour la construction des MLIPs seront explorés, optimisant ainsi l'ensemble du processus, depuis la génération des potentiels jusqu'aux simulations de dynamique. De plus, des stratégies automatisées seront développées pour la sélection des configurations générées par AIMD afin d'améliorer l'entraînement des MLIPs. Cette méthodologie sera appliquée à des interactions gaz-surface sélectionnées dans divers domaines scientifiques, notamment la chimie atmosphérique et astrophysique ainsi que les interfaces plasma-matériau.

Ce projet pluridisciplinaire intégrera la modélisation théorique, les simulations pilotées par l'IA et le calcul haute performance afin de répondre aux questions fondamentales sur la dynamique des réactions aux interfaces gaz-solide.

## Profil recherché :

**Diplôme exigé :** Doctorat en Sciences Chimiques

**Compétences requises - Compétences souhaitées :** La candidate ou le candidat présentera un profil de recherche de physico-chimiste théoricien(ne) spécialisé(e) dans la dynamique des interactions gaz-surface, pouvant s'inscrire de fait dans les thématiques de recherche du groupe de Chimie Théorique et Modélisation de l'Institut des Sciences Moléculaires (ISM, UMR5255) et celles du Laboratoire Transfrontalier Conjoint QuantumChemPhys (UB/EHU-UPV, DIPC). Ses compétences seront orientées vers les calculs de structure électronique des interfaces (DFT, Density Functional Theory) et le traitement de la dynamique de collision par des approches classiques et quantiques. Des connaissances en mécanique semi-classique ainsi que des notions concernant la construction de potentiels d'interaction réactifs par des méthodes d'intelligence artificielle (MLIP, Machine Learning Interaction Potentials) constitueront un point très appréciable. La programmation informatique (FORTRAN, Python, Bash, ...) et la pratique du calcul Haute Performance (HPC) doivent être familières.

## Contacts

**Contact pédagogique :**

Denis DEFFIEUX – Directeur UF de Chimie – denis.deffieux@u-bordeaux.fr – 05 40 00 26 22

**Contact recherche :**

Pascal LARREGARAY - Responsable équipe Théo - pascal.larregaray@u-bordeaux.fr

## Modalités de candidature

Votre dossier de candidature, constitué des documents suivants :

- Curriculum Vitae
- Lettre de motivation
- Copie du (ou des) diplôme(s) exigé(s)
- Copie d'une pièce d'identité

doit être transmis à l'établissement **EXCLUSIVEMENT SOUS FORMAT NUMERIQUE COMPRESSE (.zip)**, au plus tard le **24 avril 2025 à 16h** (heure de Paris), en le déposant dans l'application ouverte à cet effet : <https://www.iut.u-bordeaux.fr/agdor> et en sélectionnant la campagne "2025 - Recrutement CDD LRU Enseignant-Chercheur" sous la structure de rattachement "Collège Sciences et Technologies".