

CONCOURS ITRF – SESSION 2024

Corps : Ingénieur de recherche
BAP : E
EMPLOI TYPE : Expert-e en calcul scientifique
NOMBRE DE POSTES OFFERTS : 1
ETABLISSEMENT : Université de Lille
LOCALISATION DU POSTE : Laboratoire PC2A UMR 8522 CNRS-Université de Lille

CATEGORIE : A

NATURE DU CONCOURS : EXTERNE

INSCRIPTION SUR INTERNET: **Les inscriptions aux concours ITRF seront ouvertes du mardi 02 avril 2024** (12 heures, heure de Paris) **au mardi 30 avril 2024** (12 heures, heure de Paris).

DEFINITION ET PRINCIPALES CARACTERISTIQUES DE L'EMPLOI TYPE : E1E45
<https://data.enseignementsup-recherche.gouv.fr/pages/referens/>

MISSIONS :

La mission principale qui sera confiée à la personne recrutée est la mise en œuvre de méthodes de chimie théorique performantes et adaptées pour apporter compétence et appui scientifique aux chercheurs du laboratoire PC2A dans leurs thématiques de recherche.

Il est donc attendu de la personne recrutée une très haute maîtrise des outils de simulation moléculaire, afin d'accompagner et conduire des projets de recherche sur des sujets de chimie atmosphérique et de chimie de la combustion. Elle devra être immédiatement opérationnelle.

Le poste requiert une vraie polyvalence des savoir-faire de par la nature des systèmes étudiés : composés organiques volatils, éventuellement halogénés, mercurés, sélénés..., composés cycliques de petite et grande taille avec ou sans hétéroatomes (N, O, halogènes, S, P...), hydrocarbures aromatiques polycycliques, polluants émergents type pesticides, plastiques, PFAS.

Sont en particulier attendues, au sein de ces projets, une participation active aux calculs, à leur interprétation et au rendu des résultats, et des propositions de méthodologies théoriques innovantes et adaptées à l'étude de la réactivité en phases gazeuse et aqueuse, avec un objectif porté essentiellement sur la détermination des données thermocinétiques et des voies réactionnelles gouvernant la formation et/ou dégradation des espèces d'intérêt.

L'IGR devra participer activement à la formation et l'encadrement des étudiants et personnels du laboratoire.

Il sera demandé à la personne recrutée d'assurer la valorisation auprès de publics variés (chercheurs, ingénieurs et techniciens, étudiants et grand public) et la communication sur le web et les réseaux sociaux (X et LinkedIn) pour renforcer le rayonnement à l'international du laboratoire PC2A.

La personne recrutée exercera également des responsabilités collectives au niveau du laboratoire PC2A, notamment la gestion, le maintien à niveau et le développement des logiciels de calculs.

ACTIVITES PRINCIPALES :

Apporter aux chercheurs une expertise dans l'utilisation des méthodes de chimie théorique et d'évaluation des risques d'exposition aux polluants pour la modélisation de processus environnementaux
Orienter vers les méthodes et les outils pertinents en fonction du problème posé
Participer à des projets de recherche sur des thématiques du laboratoire PC2A au plan national et international et aux publications associées
Assurer la gestion du cycle de vie des données du calcul, leur organisation et le suivi de leur exploitation jusqu'à leur visualisation
Transmettre les connaissances et les compétences en matière de calcul scientifique, au travers de présentations et de formations
Définir une veille technologique sur l'évolution des logiciels, des architectures matérielles et des systèmes concernés

COMPETENCES PRINCIPALES

Connaissances

Outils de calculs scientifiques

Modélisation à l'échelle moléculaire : méthodes de chimie théorique en chimie quantique (ab initio, DFT, multiréférence type CASPT2 pour déterminer la correction due au couplage spin orbite) et dynamique moléculaire

Simulations numériques pour évaluer les risques d'exposition aux polluants

Connaissance des principaux logiciels commerciaux ou libres et maîtrise de leur pratique (Gaussian, Molcas, Molpro, ECOSAR, etc.)

Langages de programmation (C++, Python)

Langue française : minimum B2

Langue anglaise : minimum B2

Compétences opérationnelles

Niveau de formation : Ingénieur et/ou docteur en chimie ou physique avec une spécialité chimie théorique

Piloter un projet

Encadrement d'étudiants

Conduite de projets de recherche

Apporter des réponses à des besoins spécifiques

Mettre en œuvre une démarche qualité

Rédiger des documents

Accompagner et conseiller

Communiquer et faire preuve de pédagogie

Assurer une veille scientifique et technologique

Compétences comportementales

Autonomie

Travail d'équipe

Capacité de conceptualisation

Capacité de décision

Capacité de raisonnement analytique

Excellent sens relationnel

Lieu d'exercice :

Laboratoire PC2A, Bâtiment C11, Cité Scientifique, Villeneuve d'Ascq.

Le Laboratoire PC2A, UMR 8522 CNRS/Université de Lille, est un laboratoire reconnu sur le plan national et international pour ses activités de recherche concernant les problématiques d'ordre énergétique et environnemental, relatives à la physicochimie des processus de combustion et de l'atmosphère. Ses travaux s'inscrivent dans le cadre de grands programmes de recherche, comme le Labex CaPPA ou le CPER ECRIN, et dans des projets compétitifs notamment ANR.

L'IGR sera intégré.e à l'équipe « Simulations Moléculaires des Processus Environnementaux ».

L'IGR sera également intégré.e au pôle technique du laboratoire, pour des missions d'intérêt collectif.

L'IGR sera amené.e à se déplacer pour participer à des congrès nationaux et internationaux, ainsi que pour des séjours dans des laboratoires partenaires.

CONDITIONS REGLEMENTAIRES :

Voir l'[article 15 du décret n° 85-1534 du 31 décembre 1985](#)

- conditions générales d'accès à la fonction publique (art. [L321-1](#), [L321-2](#) et [L321-3 du Code général de la fonction publique](#)),
- aucune condition d'âge et de nationalité
- être titulaire à la date de la première épreuve d'un diplôme classé au moins au niveau 7 au sens du répertoire national des certifications professionnelles (RNCP). Selon la classification actuelle des degrés de certification RNCP, ce niveau correspond aux diplômes Master 2 ou aux diplômes équivalents au bac+5.
- Les candidats non titulaires d'un des titres ou diplômes précités peuvent demander une équivalence :
 1. au titre de leurs titres et diplômes (titre universitaire étranger),
 2. de leur expérience professionnelle. La demande d'équivalence à remplir est fournie avec le dossier de candidature.

Personne(s) à contacter pour tout complément d'information sur le poste

Nom et prénom : LOUIS Florent

Fonction : Maître de Conférences, responsable de l'équipe « Simulations Moléculaires des Processus Environnementaux »

Mail : florent.louis@univ-lille.fr

ETABLISSEMENT AFFECTATAIRE

Université de Lille

Responsable concours ITRF : EMILIE VERMEULEN

Tel : 03 62 26 95 53

ou emilie.vermeulen@univ-lille.fr