

## **Poste de Maître de Conférences en Calcul Ab initio de la Structure Electronique à l'IPCMS**

L'IPCMS souhaite recruter un(e) Maître de Conférences (MCF) afin de renforcer son potentiel de recherche dans le domaine des calculs et simulations numériques pour la Matière Condensée. Les calculs de structure électronique basés sur les premiers principes constituent en effet de puissants outils prédictifs et complémentaires de l'expérience dans de nombreux domaines identifiés comme des axes de recherche prioritaires du laboratoire tels que les matériaux moléculaires pour la spintronique et la nanoélectronique, les matériaux bidimensionnels et leurs hétérostructures pour l'optique et la photonique ou les oxydes pour le photovoltaïque et les dispositifs multifonctionnels. La personne recrutée devra posséder une solide expérience dans le domaine de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et être apte à adapter les codes existants tels que ABINIT, VASP, CP2K, Quantum ESPRESSO, ABINIT, SIESTA, ELK ou FLEUR aux problématiques du laboratoire. Les méthodes ab initio dont la maîtrise est souhaitable dans ce contexte sont la théorie de la fonction de Green hors équilibre nécessaire pour traiter le transport électronique, le potentiel correctif de Hubbard (DFT+U), DMFT indispensable pour rendre compte des effets liés à la localisation de charges, dans les oxydes en particulier, ou bien la DFT dépendante du temps (TD-DFT) ou GW-BSE afin de traiter les phénomènes liés à l'absorption de la lumière.

Le/la MCF intégrera le Département Magnétisme et Objets NanoStructurés (DMONS) et contribuera à l'un ou plusieurs des axes de recherche qui y sont développés, tels que le transport quantique, dépendant du spin ou non, les propriétés optiques et ferroïques des oxydes fonctionnels, les effets de proximité dans les dispositifs combinant matériaux bidimensionnels et nanoaimants ou les dynamiques excitoniques dans les hétérostructures de van der Waals. Il/elle travaillera également en collaboration étroite avec l'équipe "Simulation & Modélisation de (Nano)Matériaux Complexes" du Département Surfaces et Interfaces (DSI) afin de compléter l'expertise de l'IPCMS dans le domaine de la modélisation multi-échelle des matériaux. Dans ce contexte, il/elle sera idéalement capable de développer les interfaces nécessaires pour combiner DFT, GW, DMF et méthodes de simulations atomistiques à grande échelle (Dynamique Moléculaire, Monte Carlo). Le/la MCF doit pouvoir enseigner tous les cours de physique en licence (en Français) et en master (en Anglais). Pour plus de renseignements contacter Dietmar Weinmann ([weinmann@ipcms.unistra.fr](mailto:weinmann@ipcms.unistra.fr)), Président du comité de sélection ou Mébarek Alouani ([mea@unistra.fr](mailto:mea@unistra.fr)), membre du comité de sélection.