

INTITULE DU POSTE : Post Doctorat**Catégorie : A****Corps : chercheur post doctorant****Service/Composante : Laboratoire ICR UMR 7273 - UFR Sciences****Localisation du poste : UMR 7273 équipe CT. Service D 42 – Saint-Jérôme – Avenue Escadrille Normandie Niémen – 13013 Marseille****BAP : B****Emploi type : chercheur post doctorant (INM 511)****Date de vacance du poste : à compter du 01/11/2018****Missions et activités principales :**

Le(La) candidat(e) travaillera au développement et à l'application de méthodes de simulation de la dynamique non-adiabatique classique-quantique mixte avec détachement d'électrons. Les méthodes doivent être développées dans le contexte du « surface hopping » et intégrées dans la plateforme Newton-X. L'objectif est de fournir un ensemble complet d'outils pour simuler la compétition entre la conversion interne et le détachement d'électrons dans les anions moléculaires de vie courte. Ces outils comprennent des algorithmes pour la probabilité de détachement, l'échantillonnage de l'espace de phase et le traitement des événements rares. Les outils développés devraient être appliqués à une série de cas d'essai et comparés à la modélisation quantique exacte. Le(la) candidat(e) doit également postuler des fonds supplémentaires pour financer la recherche de sources nationales, européennes et internationales.

English translation:

The candidate will work on the development and application of methods for simulation of nonadiabatic mixed-quantum classical dynamics with electron detachment. The methods should be developed in the context of surface hopping and integrated into the Newton-X platform. The aim is to provide a complete set of tools to simulate the competition between internal conversion and electron detachment in transient anions. These tools include algorithms for detachment probability, phase space sampling, and rare event treatment. The developed tools should be applied to a series of test cases and compared to exact quantum modeling. The candidate is also expected to apply for additional funds to finance the research from national, European and international sources.

Positionnement hiérarchique :

Rattachement hiérarchique direct : Mario BARBATTI, Pr. Chair d'Excellence A*Midex

Compétences requises :

- Expérience approfondie des méthodes de détachement d'électrons et « surface hopping ».
- Expérience sur les méthodes de chimie quantique d'états excités.
- Bonne connaissance de langages de programmation (Fortran et Perl).

Environnement et contexte de travail :

- Il (Elle) sera rattachée à l'équipe de CT de l'ICR sous la responsabilité de M. BARBATTI, sur le site de Saint-Jérôme de l'Université Aix Marseille, et travaillera en collaboration avec les chercheurs de cette équipe dans le cadre de la chaire d'excellence A*Midex et du projet ANR WSPLIT.
- Le(La) candidat(e) se conformera aux horaires du laboratoire.
- Le(La) candidat(e) participera aux réunions de travail et de suivi de projet régulièrement organisées par l'Equipe de rattachement CT.
- Le(La) candidat(e) tiendra à jour les cahiers d'expériences, conformément aux Bonnes Pratiques de Laboratoires (Aix-Marseille Université).