

Equipe EC-Mo

Pr. Raphaël Terreux
Responsable d'équipeDurée du poste : 2 ans
Date de début : Septembre 2022Ville : Lyon, France.
Laboratoire : Equipe EC-Mo / LBTi UMR N°5305 CNRS UCBL**Offre de post-doctorat en modélisation moléculaire, développement en apprentissage automatique.**

Simulation des propriétés physicochimiques de molécules hautement énergétiques (HE). Contribution à la conception rationnelle des molécules HE.

Le stockage d'énergie dans des molécules chimiques permet d'en développer des applications spécifiques, notamment dans le domaine de la propulsion. La recherche et le développement de nouvelles générations de molécules plus énergétiques aux propriétés physico-chimiques compatibles à la fois avec l'environnement et la sécurité sont nécessaires pour relever les défis de demain dans le domaine spatial. En raison de la synthèse particulièrement complexe de ces molécules, la conception rationnelle de nouvelles cibles et la simulation de leurs propriétés physico-chimiques et de leur toxicité sont nécessaires pour ne synthétiser que des molécules prometteuses. La réglementation actuelle sur les substances chimiques nécessite une prise en compte plus large des risques toxicologiques dans les matières énergétiques. En effet, ces risques deviennent progressivement un critère de sélection des formulations.

Notre laboratoire a déjà réussi à simuler la toxicité des molécules HE et le bagage nécessaire pour étudier et développer ce domaine. Pour faire ces prédictions, des relations structure-activité et un apprentissage automatique à partir de descripteurs peuvent être utilisés.

Profil:

Le candidat aura complété son doctorat dans le domaine de la bio-informatique ou de la chimio-informatique et aura des compétences en programmation algorithmique (python requis, C++ serait un plus) ainsi qu'apprentissage automatique. Une expérience dans le domaine des statistiques, du QSAR ou de sera appréciée.

Le candidat retenu sera embauché par le CNES et le salaire sera déterminé en fonction de la grille CNES. Le poste est à IBCP Lyon, France.

Courriels contact :Pr Raphaël Terreux : raphael.terreux@ibcp.fr
Dr Emmanuel Bettler : emmanuel.bettler@ibcp.fr