

Chaire de professeur junior –2025

Fiche projet type

| | |
|---|---------------------------|
| Établissement/organisme porteur : | CY CERGY PARIS UNIVERSITE |
| Nom du chef d'établissement/d'organisme : | Laurent GATINEAU |
| Site concerné : | LPPI-Neuville-sur-Oise |
| Région académique : | Académie de Versailles |

Établissements/organismes partenaires envisagés :

Aucun

Nom du projet :

Modélisation moléculaire pour l'électronique organique

Mots-clés :

Modélisation moléculaire - Matériaux pour l'électronique organique - Séparation de charges – Interface - Polarisation de la lumière

Durée visée :

5 ans

Thématique scientifique :

Chimie physique et analytique

Section (s) CNU/CoNRS/CSS correspondante (s) :

CNU : 31

Stratégie d'établissement :

CY Cergy Paris Université dispose déjà d'un potentiel et une reconnaissance significative dans les domaines des sciences sociales, de la modélisation et des sciences du patrimoine. Sa stratégie de développement scientifique vise maintenant à accroître son potentiel scientifique dans le domaine des sciences expérimentales et, en particulier, dans celui des sciences des matériaux. Dans le cadre de cette CPJ, les matériaux étudiés via des outils de modélisation trouvent leur application principalement dans le domaine du photovoltaïque et de l'électronique organique. Ils s'inscrivent donc dans le contexte des énergies renouvelables en accord avec la préoccupation prioritaire de CY en matière de "développement durable". Cette CPJ a également pour objectif de consolider et de développer notre réseau de partenaires internationaux. Elle participera donc *de facto* à la stratégie de développement scientifique international de CY qui est actuellement portée par CY Advanced Studies. De plus, les travaux de recherche menés par le laboratoire dans cette thématique jouissent d'une très bonne visibilité internationale (publications dans les meilleures revues et collaborations avec des partenaires internationaux prestigieux) qu'il est impératif de pérenniser, contribuant ainsi à consolider celle de notre établissement.

Stratégie du laboratoire d'accueil :

Le Laboratoire de Physicochimie des polymères et des Interfaces (LPPI) conçoit, synthétise et caractérise des matériaux polymères multi-composants et des (macro)molécules π -conjuguées, en particulier pour des applications en conversion et stockage de l'énergie. Ces recherches à fort potentiel d'application sont généralement développées via des partenariats industriels. Parallèlement, le laboratoire développe des collaborations académiques internationales, dont certaines sont soutenues par des projets européens.

Pour s'inscrire dans la stratégie d'internationalisation de la recherche de l'université, le laboratoire souhaite renforcer et développer les échanges internationaux dans le domaine de la modélisation moléculaire pour l'électronique organique, domaine qui sous-tend le fonctionnement de la plupart des dispositifs que le LPPI développe. Cette stratégie sera soutenue par cette Chaire de Professeur Junior (CPJ) qui pourra s'appuyer sur nos partenaires internationaux. Cette chaire permettra de consolider l'excellence du LPPI dans ce domaine de recherche.

Résumé du projet scientifique :

A partir de septembre ou octobre 2025, la personne recrutée sera en charge de la thématique « modélisation moléculaire » pour l'électronique organique, en se focalisant dans un premier temps sur les applications concernant les cellules solaires organiques et/ou hybrides et les diodes électroluminescentes organiques, développées au sein du laboratoire. L'accent sera mis sur les propriétés d'interface (défauts, niveau d'énergie, désordre/ordre, etc.) qui sont critiques pour l'efficacité des dispositifs électroniques organiques. La présence de chiralité dans les matériaux sera considérée en rapport avec l'ordre/le désordre dans les interfaces organique / (in)organique. Par ailleurs, le moment dipolaire magnétique de transition lié à l'absorption de la lumière sera ensuite considéré du fait de sa potentielle importance dans toutes les applications impliquant la polarisation de la lumière. L'étape suivante consistera à prévoir l'impact de l'état solide (amorphe / semi-cristallin) sur les propriétés microscopiques. L'introduction d'outils liés à l'intelligence artificielle (IA) dans ces activités de recherche sera pleinement envisagée.

Résumé du projet d'enseignement : 15 lignes maximum

A partir de septembre ou octobre 2025, la personne recrutée participera à l'élaboration des programmes d'enseignement de la nouvelle école d'ingénieurs CY Tech, de l'Institut des Sciences et Techniques et du département de chimie. A terme, elle sera responsable de l'organisation de l'ensemble des enseignements de « Chimie théorique » dans les cycles de licence, de master et d'ingénieur. En accord avec le parcours des étudiants, ces enseignements concerneront en particulier la mécanique quantique au niveau de l'atome, la liaison chimique, l'introduction à la modélisation moléculaire et à l'intelligence artificielle. Ils seront dispensés sous forme de cours et travaux pratiques, ainsi que par la direction de stages en modélisation moléculaire. L'introduction de méthodes pédagogiques innovantes sera envisagée. La personne recrutée pourra à terme participer également au pilotage de ces formations.

Synthèse financière :

| | |
|--|-----------|
| Total financé sur CPJ (dont package ANR) | 200 000 € |
| Co-financement | 25 000 € |
| Total du projet | 225 000 € |

Diffusion scientifique :

Le laboratoire a une politique de publication de recherche fondamentale dans des revues scientifiques à comité de lecture de très haut niveau (<https://hal.science/search/index?q=LPPI>) et par des communications dans les conférences internationales, workshop et séminaires invités dans laquelle la personne recrutée s'inscrira.

Le chercheur sera aussi encouragé en deuxième partie de contrat à donner des séminaires dans des laboratoires/instituts français et internationaux L'organisation de conférences internationales telles que IPOE (<https://ipoe2019.sciencesconf.org/>) qui a été initiée par le LPPI est également envisagée.

Science ouverte

La personne recrutée, comme le laboratoire, respectera bien entendu les principes posés par la communauté internationale de la recherche académique : publications dans des revues open access, dépôt des travaux sur l'archive CY-Hal, présentation des travaux dans des conférences et workshops. La publication de données éventuelles sur des serveurs institutionnels publics, avec obtention d'un DOI est aussi possible.

Science et société :

L'électronique organique est à la base de la compréhension de nombreux phénomènes que nous utilisons tous les jours (OLED, panneaux photovoltaïques, ...). Il est donc important de comprendre les principes « microscopiques » qui s'y déroulent pour pouvoir les améliorer et les développer. Il en est de même pour le stockage de l'énergie, problématique très à la mode actuellement. Toutefois, on s'aperçoit d'importants problèmes d'information du public et d'acceptabilité sociétale. Ainsi, la chaire augmentera très utilement notre expertise sur ces questions pour contribuer à l'information précise du grand public.

Pour cela chaire bénéficiera de l'expérience du LPPI qui interagit régulièrement avec le public, par exemple en participant aux actions de CY (Let's CY, Fête de la Science, Journées Porte-Ouverte ...). Ces exemples démontrent que la chaire sera dans un environnement favorable pour accompagner chaque fois que possible l'université dans ses actions de médiation scientifique pour et avec la société.

Indicateurs :

La taille moyenne de notre laboratoire (24 permanents) permet un suivi informel des activités de ses membres. Le directeur du laboratoire fera le suivi de recherche annuellement tandis qu'un référent assurera le soutien sur l'enseignement.

Un bilan à mi-parcours de l'état d'avancement des différentes activités sera fait sous la forme d'une présentation devant le Conseil de laboratoire. Il est également attendu du titulaire de la chaire qu'il soutienne son habilitation à diriger des recherches (HDR) avant la fin du contrat. A l'issue des cinq ans prévus du contrat, la/le titulaire de la chaire fera un rapport détaillé sur les réalisations du projet avant l'évaluation par le Conseil de Laboratoire, puis par le Comité de titularisation.

Ce rapport mettra en avant les éléments d'excellence scientifique académique : publications ACL, séminaires et communications invités, obtentions de contrats publics (ANR, Horizon Europe,...), organisation de conférences, encadrement d'étudiants en master, en doctorat, et post-doctorants. Il tiendra compte aussi de critères informels sur la réputation acquise auprès d'autres spécialistes de la discipline et auprès des co-auteurs des articles. Il mentionnera enfin l'état du réseau international auquel il appartient. En outre, un équilibre sera recherché entre la recherche personnelle (par exemple la recherche méthodologique en simulation numérique) et les collaborations avec les membres du laboratoire sur les grands axes d'application des simulations.

Pour quantifier l'évaluation il est attendu sur la durée de la Chaire à un minimum de :

- quatre publications Q1 issues des recherches développées au LPPI ;
- trois communications dans des conférences internationales ;
- la soumission d'au moins un projet ANR ou programme européen (Horizon Europe, ERC, ...).
- la soutenance de l'habilitation à diriger des recherches (HDR)

En complément de ces critères prioritaires, le rapport présentera le travail fait en enseignement et les évaluations par les étudiants. La communication auprès du grand public sera également détaillée (journées portes-ouvertes, fête de la Science, présentation à l'université ouverte de CY,...).

Chaire de professeur junior CPJ - 2025

| | |
|------------------------------------|---------------------------|
| University : | CY CERGY PARIS UNIVERSITE |
| Name of head of university: | Laurent GATINEAU |
| Site (place) : | LPPI-Neuville-sur-Oise |
| Academic region : | Académie de Versailles |

Partner institutions/Organizations:

None

Project name :

Molecular modeling for organic electronics

Keywords:

Molecular modeling - Materials for organic electronics - Charge separation - Interface - Circular polarization of light

Target duration:

5 years

Scientific topics:

Physical and analytical chemistry

Section (s) CNU/CoNRS/CSS:

CNU : 31

University strategy:

CY Cergy Paris Université already has significant potential and recognition in the fields of social sciences, modeling and heritage sciences. Its scientific development strategy now aims to increase its scientific potential in materials science. Within the framework of this Chaire de Professeur Junior (CPJ), the materials studied via modeling tools are applied mainly in the fields of organic electronics, including Hybrid- and Organic Solar cells, organic light emitting diodes (OLEDs), etc. They therefore fall within the context of renewable energies, in line with CY's priority concern for "sustainable development". This CPJ also aims to consolidate and develop LPPI's network of international partners. It will therefore play a role in CY's international scientific development strategy, which is currently carried out by CY Advanced Studies. In addition, the research work carried out by the LPPI laboratory in this theme benefits from very good international visibility (publications in the best journals and collaborations with prestigious international partners) which it is imperative to perpetuate.

Host laboratory strategy:

The « Laboratoire de Physicochimie des polymères et des Interfaces » (LPPI) (<https://lppi.cyu.fr/english-version>) designs, synthesizes and characterizes multi-component polymer materials and π -conjugated (macro)molecules in particular for applications in energy conversion and storage. This research with strong application potential is generally developed via industrial partnerships. At the same time, the laboratory develops international academic collaborations, some of them supported by European projects.

To be part of the university's research internationalization strategy, the laboratory wishes to strengthen and develop international exchanges in the field of molecular modeling for organic electronics, a field which underlies the operation of most devices that the LPPI develops. This strategy will be supported by this Junior Professor Chair (CPJ) which will be able to rely on our international partners. This Chair will help consolidate LPPI's excellence in this field of research.

Summary of the scientific project:

Starting from September or October 2025, the person recruited will be in charge of the "molecular modeling" theme for organic electronics, initially focusing on applications to organic and/or hybrid solar cells and organic light-emitting diodes, developed within the laboratory. The focus will be on interface properties (defects, energy level, disorder/order, etc.) that are critical for the efficiency of organic electronic devices. The presence of chirality in materials will be considered in relation to order/disorder in organic / (in)organic interfaces. Furthermore, the transition magnetic dipole moment linked to the absorption of light will then be considered because of its potential importance in all applications involving the circular dichroism and polarization luminescence. The next step will be to predict the impact of the solid state (amorphous/semi-crystalline) on the microscopic properties. The introduction of tools related to Artificial Intelligence (AI) in these research activities will be fully envisioned.

Summary of teaching project:

Starting from September or October 2025, the recruited person will participate in the development of the teaching programs of the new engineering school CY Tech, of the Science and Technics Institute and of the chemistry department. Ultimately, he/she will be responsible for organizing all "Theoretical Chemistry" teaching in the bachelor's, master's and engineering cycles. Depending on the student's background, these courses will cover quantum mechanics at the atomic level, chemical bonding, an introduction to molecular modeling and artificial intelligence. They will be given through lectures and practical work, and the supervision of internships in molecular modeling. The introduction of innovative teaching methods will be considered. The recruited person will eventually be able to also participate in the management of these training courses.

Financial summary (excluding salary):

| | |
|---|-----------|
| Total financed by CPJ (including ANR package) | 200 000 € |
| Co-financing | 25 000 € |
| Project total | 225 000 € |

Scientific dissemination:

The laboratory has a policy of publishing fundamental research in very high-level peer-reviewed scientific journals (<https://hal.science/search/index?q=LPII>) and through communications in international conferences, workshops and invited seminars, policy in which the recruited person will be involved.

The researcher will also be encouraged in the second part of the contract to give seminars in French and international laboratories/institutes. The organization of international conferences such as IPOE (<https://ipoe2019.sciencesconf.org/>) which was initiated by the LPPI is also considered.

Open Science :

The person recruited, like the laboratory, will naturally respect the principles established by the international academic research community: publications in open access journals, deposit of research work in the CY-Hal archive, presentation of work at conferences and workshops.

Science and Society :

The scientific research in Organic electronics is the basis for understanding many of the phenomena occurring in many devices that we use every day (OLEDs, photovoltaic panels, etc.). It is therefore important to better understand the "microscopic" principles behind them, so that we can improve and develop them. The same applies to energy storage, a very fashionable subject at the moment. However, there are major problems of public information and societal acceptability. The Chair will be a valuable addition to LPPI's expertise in these fields, helping to ensure that the general public is properly informed.

To this end, the Chair will benefit from the experience of the LPPI, which regularly interacts with the public, for example by taking part in CY events (Let's CY, Science Festival, Open Days, etc.). These examples show that the Chair will be in a favorable environment to best support the university in its scientific mediation actions for and with society.

Indicators:

The medium-size of our laboratory (24 permanent staff) enables an informal ongoing monitoring of its members' activities. The laboratory director will ensure annual monitoring of CPJ's research, while a referent will provide support for teaching.

A mid-term assessment will be made in the form of a presentation to the Laboratory Council on the progress of the various activities. It is also expected of the chairholder to defend his/her habilitation to steer research (HDR) before the end of the contract. At the end of the 5 contract, he/she will produce a detailed report on the project's achievements, before being evaluated by the Laboratory Council and then by the Tenure Committee for a Full Professor position.

This report will highlight elements of academic scientific excellence: publications, seminars and invited papers, grants (ANR, Horizon Europe, etc.), organization of conferences, supervision of master's, doctoral and post-doctoral students. The report will also take into account informal criteria on the reputation acquired with other specialists in the discipline and with the co-authors of the articles. Finally, it will mention the status of the international

network to which the chairholder belongs. In addition, a balance will be sought between personal research (e.g. methodological research in numerical simulation) and collaborations with laboratory members on major simulation applications.

To quantify the assessment, it is expected a minimum of :

- 4 publications Q1 from research developed at LPPI;
- 3 communications in international conferences;
- submission of at least one ANR project or European program (Horizon Europe, ERC, ...).
- defense of the habilitation to steer research (HDR)

In addition to these priority criteria, the report will present teaching work and student evaluations. Communication with the general public will also be detailed (open days, Fête de la Science, etc.).

Application File

The number of pages should not exceed 15 pages

Last name:

First name:

1. Curriculum vitae.

Give the main stages of your career

2. Career highlights.

Awards, important publications, other

3. Report of research activities to date

If relevant, you can specify for each research activity described:

- related references
- the rank of "authorship" (first author, corresponding author, "%" contribution)
- the "degree" of your independence
- eventual supervisions from your part
- highlight your role (conceptualization of the project, implementation, ...)
- highlight the novelty / state of the art

4. Research Project at LPPI

In the research project description, you can (if appropriate) specify the connection with the theoretical and experimental research themes of the LPPI.

5. Teaching experiments

This section should be short, since the candidate will essentially be recruited on criteria linked to research

Annex (not included in the 15 pages)

List of publications, guest lectures, oral lectures.... A hyperlink may also be suitable