

Curriculum Vitæ

Dr. Sébastien Lebegue

Directeur de recherche CNRS (Section 13)

Responsable de l'axe "Etat Solide : structure et propriétés", Laboratoire LPCT, Nancy.

Adresse :

Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques LPCT (UMR CNRS 7019)

Institut Jean Barriol (IJB)

Faculté des Sciences et Techniques, Université de Lorraine

BP 70239, Boulevard des Aiguillettes

54506 Vandoeuvre-lès-Nancy CEDEX

France

E-mail : sebastien.lebegue@univ-lorraine.fr

Nationalité : Française

Langues : Anglais (courant), Français (natif)

Parcours scientifique/Education

- Oct 2017** : Promu directeur de recherche CNRS
- Dec 2013** : Habilitation "**Modélisation ab initio de la structure électronique des matériaux**".
Comité : X. Blase, C. Delerue, H. Dreyssé, J. Ángyán, S. Biermann, M. Chshiev, V. Olevano.
- Nov 2005** : Chargé de recherche CNRS, Laboratoire CRM², Nancy, France
- Nov 2003- Nov 2005** : Postdoctorant à l'université de Uppsala University (Suède).
- 2000-2003** : Doctorant à l'Institut de Physique et de Chimie de Strasbourg (IPCMS) sous la direction de M. Alouani. Titre : **Etude des corrélations électroniques dans les matériaux par la méthode GW**. Thèse soutenue le 25/11/2003.
Comité : H. Dreyssé (ULP Strasbourg), S. Blügel (FZ Jülich), B. Hönerlage (ULP Strasbourg), L. Reining (Laboratoire des Solides Irradiés, Ecole Polytechnique).
- Aug 2002- Dec 2002** : Chercheur invité à UC Davis (USA) dans le groupe de W. Pickett.

Activité scientifique

Mots clés : Simulations, Chimie Théorique, Calcul ab initio, Structure électronique des matériaux, Etats excités.

Je développe et utilise des méthodes de calculs de type ab initio afin de comprendre les propriétés électroniques et structurales des solides. Parmi celles-ci figurent la DFT, l'approximation GW (pour les états excités), et la RPA (pour décrire la corrélation électronique et les forces de van der Waals). Les applications concernent l'étude de la structure électronique des matériaux 2D dérivés du graphène tels que MoS₂, le graphane etc.. et j'ai mis au point une méthode de type "datamining" dans la base de donnée ICSD pour découvrir de nouveaux matériaux 2D. En parallèle, j'ai participé à l'implémentation dans le code VASP de plusieurs corrections semi-empiriques pour la description des forces de van der Waals. Ceci a permis différentes études sur les composés à transition de spin, les matériaux 2D, et les solides hautement énergétiques. Plus récemment, je me suis intéressé aux phénomènes de désaimantation ultrarapide sous impulsion laser des matériaux magnétiques, ainsi qu'au processus de flottaison utilisé dans l'industrie minière pour la séparation des métaux, afin d'en obtenir une description microscopique.

Enseignement, Formation, et responsabilités administratives

Je suis particulièrement investi dans la formation de jeunes chercheurs (stagiaires, doctorants, postdoctorants) : au cours de ces dernières années j'ai dirigé 6 thèses et encadrés 8 postdoctorants. Cet encadrement est souvent partagé avec un collègue jeune chercheur (McF ou CR) afin de lui faire gagner en expérience d'encadrement mais aussi de renforcer les collaborations et les échanges dans le laboratoire et l'axe état solide. J'accueille également régulièrement des collègues enseignants-chercheurs en poste dans des universités à l'étranger. En parallèle, j'assure depuis l'année universitaire 2020-2021 un service d'enseignement à l'école des Mines de Nancy, sous la forme de TD de Physique Statistique. Cette activité d'enseignant est complétée depuis la rentrée 2022 par un CM/TD de mécanique quantique avancée pour les étudiants de 2A de l'école.

Au cours de ma carrière, je me suis également investi dans différentes responsabilités collectives, telles que responsable d'équipe, responsable d'un axe d'une fédération de recherche, membre du bureau du GDR REST, ou membre élu au conseil du pôle Chimie et Physique Moléculaire de l'université de Lorraine.