
CANDIDATURE AU COMITÉ DES UTILISATEURS IDRIS

Nom: NIEHAUS

Prénom: Thomas

Laboratoire: Institut Lumière Matière, UMR5306 - UCBL - CNRS

Adresse postale du laboratoire : 10 rue Ada Byron, 69622 Villeurbanne

Téléphone: +33 472 431 571

e-mail professionnel : thomas.niehaus@univ-lyon1.fr

Comité thématique principal de GENCI au titre duquel vous présentez votre candidature:

* 9. Physique chimie et propriétés des matériaux

secondaire * 8. Chimie quantique et modélisation moléculaire

PROFESSION DE FOI

Actuellement professeur à l'Université Claude Bernard Lyon 1, je travaille dans le domaine des simulations en chimie physique depuis 2001, avec un intérêt particulier pour la théorie de la fonctionnelle de la densité. Au fil des années, j'ai eu l'occasion d'utiliser la plupart des grands codes de structure électronique utilisés en physique de la matière condensée et en chimie quantique.

En tant que co-auteur du logiciel open-source DFTB+, je me suis familiarisé avec le développement d'applications parallèles ainsi qu'avec l'utilisation des ressources de calcul intensif, notamment celles proposées par des centres nationaux comme l'IDRIS. Plus récemment, j'ai assuré la coordination des demandes de temps de calcul auprès du GENCI pour un groupe d'une dizaine de chercheurs permanents dans mon laboratoire, ce qui m'a permis d'acquérir une bonne connaissance de la procédure du point de vue des utilisateurs.

J'ai beaucoup bénéficié de l'accès aux ressources nationales de calcul, et je vois aujourd'hui une opportunité de rendre service à la communauté. Si je suis élu, je m'efforcerai de contribuer à un processus d'évaluation équitable, rigoureux et fondé scientifiquement. Je souhaite notamment veiller à ce que la diversité des approches en physique et chimie computationnelles soit bien représentée, que les projets novateurs et à risque aient une chance d'être soutenus, et que l'utilisation des ressources HPC reste responsable et efficace.

Je vous remercie pour votre attention.