

Fiche candidat

Pièces jointes

Suivi global

Suivi Postes

Banettes

 Précédente**Dossier candidat** n° ILL/05178

CV

**Date Création** 03/02/2009 16:05:00**Identité****Type Candidat :** Externe**Candidat :** M Ferraz Leal Ricardo Miguel**Titre :****Date de naissance :** 16/02/1978**Age :** 34**Situation de famille:** marié ou vie maritale**Enfants à charge:** 0**Adresse :** 36 Rue de Stalingrad**Complément d'adresse :****Code postal :** 38100**Ville :** Grenoble**Pays :** France**Nationalité :** Portugal**2ème nationalité :** non**Email :** ricleal@gmail.com**Téléphone fixe :****Téléphone portable :** 06336444510**Téléphone professionnel :****Peut-il être contacté sur son lieu de travail :** oui**Poste souhaité****Domaine d'activité :** Recherche**Filière :** Informatique**Emploi (recherché) :** INGENIEUR de RECHERCHE  
Calcul Scientifique  
Ingénieur Développeur SENIOR Scientifique  
Scientifique (Groupe Calcul Scientifique)**Emploi (affecté) :** Pas de métier renseigné.**Formation et diplômes****Niveau de formation :** BAC >5**Nom du diplôme :** PhD in Physics**Spécialité :** Physics, Biophysics, Computer vision**Etablissement** Keele University

**d'enseignement :**

Ville : Keele  
 Pays : Royaume-Uni  
 Date d'obtention  
 du diplôme : 01/02/2009

Niveau de  
 formation : BAC +5  
 Nom du  
 diplôme : Computer Science and Engineering  
 Spécialité : Physics, Mathematics, Computing,  
 Programming

Etablissement  
 d'enseignement : Instituto Superior Técnico  
 Ville : Lisbon  
 Pays : Portugal  
 Date d'obtention  
 du diplôme : 01/10/2002

**Expériences professionnelle**

Nb total  
 d'années  
 d'expérience  
 pro. : 10

Nb d'années  
 d'expérience  
 dans le domaine  
 du poste : 0

Délai de  
 préavis : 0 mois

**Employeurs :****Langues**

Langue  
 maternelle : Portuguese

Français :	Comprendre	Ecouter :	C2
		Lire :	C2
	Parler	Prendre part à une conversation :	C1
		S'exprimer oralement en continu :	C1
	Ecrire		C1
Anglais :	Comprendre	Ecouter :	C2
		Lire :	C2
	Parler	Prendre part à une conversation :	C1
		S'exprimer oralement en continu :	C1
	Ecrire		C1
Allemand :	Comprendre	Ecouter :	
		Lire :	
	Parler	Prendre part à une conversation :	
		S'exprimer oralement en continu :	
	Ecrire		

**Autres langues :** Spanish (bonnes connaissances)

**Connaissances informatique**

**Connaissances  
de base :****Bonne  
connaissances :****Très bonne  
connaissances :****Expert :** Scientific programming.  
Programming languages.  
Architecture design.**Références****Nom :** Trevor Forsyth**Position :** Professor**Adresse,  
Téléphone :** ILL and Keele university, 7158  
tforsyth@ill.fr**Peut-être  
contacté tout de  
suite :** oui

---

**Nom :** Alexander Popov**Position :** Scientist**Adresse,  
Téléphone :** ESRF, 2633 apopov@esrf.fr**Peut-être  
contacté tout de  
suite :** oui

---

**Nom :** Vicente Rey**Position :** Head of BLISS group**Adresse,  
Téléphone :** ESRF, 2534 rey@esrf.fr**Peut-être  
contacté tout de  
suite :** oui

# Ricardo Miguel Ferraz Leal

*Scientific software developer*

36 Rue de Stalingrad  
38100 Grenoble - France  
☎ +33 (0) 6 33 64 45 10  
✉ ricleal@gmail.com

## Education

- 2005 – 2009 **PhD in Physics**, *Keele University*, Keele, UK.  
Thesis entitled: "X-ray and neutron macromolecular crystallography: New methodologies and structural studies on DNA oligonucleotides" with supervision of Prof. V. Forsyth and Dr. E. Mitchell.
- 1996 – 2002 **MSc in Computer Science and Engineering (computational systems)**, *Instituto Superior Técnico*, Lisbon, Portugal.  
Main subjects studied: Mathematics, physics, programming, computer networks, electronics, digital systems. Undergraduate final year project developed in the context of a real organisation: business and IT architecture analysis, UML modelling of the business processes and design of a new IT architecture based on the business requirements.

## Work experience

- 2009 – January 2012 **Post-doc**, *European Synchrotron Radiation Facility*, Grenoble, France.  
Rendering of 3D crystal models using visual images. Analysis and development of new methodologies for X-ray data collection strategy planning taking into account radiation damage. Code mainly developed in C++ (OpenCV and CGAL libraries for 3D modelling and image processing), Matlab, Bash and Scientific Python (SciPy, SymPy, PyLab, Mayavi)
- 2005 – 2009 **PhD Student**, *European Synchrotron Radiation Facility & Institut Laue-Langevin*, Grenoble, France.  
Development of new instrumentation for the application of absorption corrections to macromolecular crystallographic X-ray diffraction data using a 3D crystal model generated photographically. Coded developed in Java and C/C++ (OpenCV)
- 2004 – 2005 **Software architect**, *European Synchrotron Radiation Facility*, Grenoble, France.  
Designed and developed a 3-tier J2EE system architecture for the the Information System for Protein Crystallography Beamlines (ISPyB). Many web applications developed onsite are still based on the framework created for this work. Web interfaces coded in Java (JSPs) using EJBs, Java Struts and JSF; MySQL and Oracle databases; JBoss Application Server.
- 2002 – 2004 **IT Consultant**, *Sybase*, Lisbon, Portugal.  
Development of a large scale *Microsoft .Net* based content management server to provide information for *Vodafone* mobile applications. Coded in Java, MS.Net C#. Developed stored procedures for Microsoft SQL Server.  
Data warehouse analysis, design and development of optimised SQL routines for data extraction, loading, migration and transformation. Sybase IQ warehouse databases.  
*Vodafone Live!* 3G web-portal project team player. Designed, coded, tested, deployed for production and provided support to the application. Coded in Java using EJBs for the Websphere application server.
- 2003 – 2004 **Freelance Tutor**, *Xpand IT & Software AG*, Lisbon, Portugal.  
Taught courses in Java using Open Source Software, including: Web Services Programming; Developing J2EE Applications using EJBs; Developing J2EE Web Applications using JSPs and Struts.
- 2004 **Freelance software developer**, *Xpand IT*, Lisbon, Portugal.  
Designed and developed a J2EE Web solution to exchange freight/cargo XML information. Open source technologies: Java, EJBs, Struts and MySQL databases.
- 2002 **IT Consultant**, *Influe*, Oeiras, Portugal.  
Installed, configured, maintained and supported INFLUE's software and Electronic Data Interchange (EDI) systems. Developed XML specifications and standards for INFLUE's clients.

## Selected Training Courses and Schools

- 2011 **Scientific Writing**, *EPN campus*, Grenoble, France.
- 2011 **EIROforum School of Instrumentation**, *EPN campus*, Grenoble, France.
- 2009 **Course on Software Development for Crystallography**, *ILL*, Grenoble, France.
- 2007 **MaxInf/CCP4 funded workshop on Phasing and refinement**, *York University*, York, UK.
- 2007 **Higher European Research Course for Users of Large Experimental Systems (HERCULES)**, *ESRF, ILL, Soleil, CNRS*, Grenoble and Paris, France.
- 2006 **BCA/CCP4 Protein Crystallography Summer School XIII**, *Oxford University*, Oxford, UK.
- 2006 **BMVA/EPSRC Summer School on Computer Vision**, *Kingston University*, Kingston upon Thames, UK.
- 2005 **Communication Skills**, *Dynargie*, Grenoble, France.
- 2005 **EJBs Development and JBoss Administration**, *Sysdeo*, Grenoble, France.
- 2005 **Hands on eXtreme Programming**, *Logilab*, Grenoble, France.
- 2003 **Pedagogical Training for Trainers**, *Naturinvest*, Lisbon, Portugal.

## Selected Oral and Poster presentations

- 2011 **Sixth International Workshop on X-ray Radiation Damage to Biological Crystalline Samples**, *SLAC National Accelerator Laboratory*, Menlo Park, CA, USA.  
Oral presentation: Experimental procedure for correcting the effects of radiation damage.
- 2009 **25th European Crystallography Meeting**, Istanbul, Turkey.  
Poster presentation: Absorption Correction and Optimal Planning of Data Collection Based on a 3D Sample Model. **Awarded Jacek Grochowski Poster Prize: Best poster at an ECM in the domain of Instruments and Experimental Techniques in Crystallography**
- 2008 **Annual Meeting of the American Crystallographic Association**, Knoxville, TN, USA.  
Poster presentation: Absorption Correction Based on a 3D Model Reconstruction from Visual Images.
- 2007 **24th European Crystallography Meeting**, Marrakesh, Morocco.  
Oral presentation: Absorption Correction based on a 3D Crystal and Support Model.
- 2005. **International Conference on Neutron Scattering**, Sydney, Australia.  
Poster presentation: The development of new facilities for X-ray and neutron diffraction in the PSB and their application to the study of complexes between DNA and anti-cancer drugs
- 2005 **SPINE/BIOXHIT Workshop on Imaging in Crystallography**, *St Anne's College*, Oxford, UK.
- 2004 **e-Science Workshop for DLS and ISIS**, *Rutherford Appleton Laboratory*, Oxfordshire, UK.

## Languages

Portuguese	Native	English	Fluent
French	Fluent	Spanish	Basic

---

Publications

- 2012 **R. M. F. Leal**, S. Russi, G. P. Bourenkov, & A. N. Popov (2012). *Characterisation of radiation damage at room temperature*. Manuscript in preparation.
- 2012 R. Giordano, **R. M. F. Leal**, G. Bourenkov, S. McSweeney, A. Popov (2012). *The application of hierarchical cluster analysis to the selection of isomorphous crystals*. *Acta Cryst. D* Accepted for publication.
- 2012 S. Brockhauser, O. Svensson, M. W. Bowler, M. Nanao, E. Gordon, **R. M. F. Leal**, A. Popov, M. Gerring, A. A. McCarthy and A. Gotz (2011). *The Use of Workflows in the Design and Implementation of Complex Experiments in Macromolecular Crystallography*. *Acta Cryst. D* Accepted for publication.
- 2011 **R. M. F. Leal**, S. Russi, G. P. Bourenkov & A. N. Popov (2011). *Characterization of radiation damage in macromolecular crystals at cryo and room temperature*. *Acta Cryst. A* **67**, C655-C656.
- 2011 S. Delagenière, P. Brechereau, L. Launer, A.W. Ashton, **R. Leal**, S. Veyrier, J. Gabadinho, E. J. Gordon, S. D. Jones, K. E. Levik, S. M. McSweeney, S. Monaco, M. Nanao, D. Spruce, O. Svensson, M. A. Walsh & G. A. Leonard (2011). *ISPyB: an Information Management System for Synchrotron Macromolecular Crystallography*. *Bioinformatics* **27**, 3186-3192.
- 2011 **R. M. F. Leal**, G. P. Bourenkov, O. Svensson, D. Spruce, M. Guizarro & A. N. Popov (2011). *Experimental procedure for the characterization of radiation damage in macromolecular crystals*. *J. Synchrotron Rad.* **18**, 381-386.
- 2010 S. C. M. Teixeira, M. P. Blakeley, **R. M. F. Leal**, S. M. Gillespie, E. P. Mitchell & V. T. Forsyth (2010). *Sweet neutron crystallography*. *Acta Cryst. D* **66**, 1139-1143.
- 2010 **R. M. F. Leal**, S. Callow, P. Callow, M. P. Blakeley, C. J. Cardin, W. A. Denny, S. C. M. Teixeira, E. P. Mitchell & V. T. Forsyth (2010). *Combined neutron and X-ray diffraction studies of DNA in crystals and solutions*. *Acta Cryst. D* **66**, 1244-1248.
- 2009 **R. M. F. Leal**, I. Belyaev, S. C. M. Teixeira, V. T. Forsyth, E. P. Mitchell & A. S. Popov (2009). *Absorption correction and optimal planning of data collection based on a 3D sample model*. *Acta Cryst. A* **65**, s160.
- 2009 S. Teixeira, M. Blakeley, **R. Leal**, E. Mitchell & T. Forsyth (2009). *What is so sweet about neutron crystallography?*. *Acta Cryst. A* **65**, s167.
- 2009 **R. M. F. Leal**, S. C. M. Teixeira, M. P. Blakeley, E. P. Mitchell & V. T. Forsyth (2009). *A preliminary neutron crystallographic study of an A-DNA crystal*. *Acta Cryst. F* **65**, 232-235.
- 2008 **R. M. F. Leal**, S. C. M. Teixeira, V. Rey, V. T. Forsyth & E. P. Mitchell (2008). *Absorption correction based on a three-dimensional model reconstruction from visual images*. *J. Appl. Cryst.* **41**, 729-737.
- 2008 S. C. M. Teixeira, M. P. Blakeley, **R. M. F. Leal**, E. P. Mitchell & V. T. Forsyth (2008). *A preliminary neutron crystallographic study of thaumatin*. *Acta Cryst. F* **64**, 378-381.
- 2007 **R. Leal**, S. Teixeira, V. Rey-Bakaikoa, E. Mitchell & T. Forsyth (2007). *Absorption correction based on a 3D crystal and support model*. *Acta Cryst. A* **63**, s78-s79.

**Ricardo Miguel Ferraz Leal**

36 Rue de Stalingrad  
38100 Grenoble, France

☎ +33 (0)6 33 64 45 10

✉ ricleal@gmail.com

Dr. Mark Johnson  
Computing for Science Group  
**Institut Laue-Langevin**  
6, rue Jules Horowitz, BP 156  
38042 Grenoble Cedex 9, France

February 26, 2012

Dear Dr. Johnson,

I am writing to express my interest in the current *Research Engineer in programming* position available in your group.

I have recently finished my post-doc and I can offer you:

- A scientific software developer with a MSc in Computer Science and Engineering, and a PhD in Physics.
- 10 years of professional experience in computing, the last 7.5 spent in a scientific environment.
- Experience in both X-ray and Neutron studies.
- Fluency in data-oriented, procedural and object-oriented programming languages.
- High quality code, professional approach and high standards.
- Expertise in leading and working with teams, and managing large projects.

I believe that I have the right qualifications and experience, and I hope you will consider me for this position. I would be pleased to be involved in this project and be part of your group.

I look forward to your reply.

Yours faithfully,

**Ricardo Miguel Ferraz Leal**

*Attachment: curriculum vitae*

Fiche candidat

Pièces jointes

Suivi global

Suivi Postes

Banettes

Précédente

Suivante

Dossier candidat n° ILL/09084



CV

Date Création 28/07/2010 19:59:00

## Identité

Type Candidat : Externe

Candidat : M VAN ESCH Patrick

Titre :

Date de naissance : 30/01/1967

Age : 45

Situation de famille: marié ou vie maritale

Enfants à charge: 1

Adresse : 12, rue Paul Vallier

Complément d'adresse :

Code postal : 38600

Ville : Fontaine

Pays : France

Nationalité : Belgique

2ème nationalité : non

Email : vanesch@ill.fr

Téléphone fixe : 04 76 96 41 74

Téléphone portable :

Téléphone professionnel : 04 76 20 76 87

Peut-il être contacté sur son lieu de travail : oui

## Poste souhaité

Domaine d'activité : Recherche

Filière : Informatique

Emploi (recherché) : Chef du Service de Contrôle des Instruments  
INGENIEUR de RECHERCHE  
Calcul Scientifique

Emploi (affecté) : Pas de métier renseigné.

## Formation et diplômes

Niveau de formation : BAC &gt;5

Nom du diplôme : Docteur en physique

Spécialité : physique experimentale des particules

Etablissement d'enseignement : Vrije Universiteit Brussel



Ville : Bruxelles  
 Pays : Belgique  
 Date d'obtention  
 du diplôme : 01/03/1998

Niveau de  
 formation : BAC +5  
 Nom du  
 diplôme : Ingenieur civil  
 Spécialité : electromechanique  
 Etablissement  
 d'enseignement : Vrije Universiteit Brussel  
 Ville : Bruxelles  
 Pays : Belgique  
 Date d'obtention  
 du diplôme : 15/07/1990

Niveau de  
 formation : Autres  
 Nom du  
 diplôme : HDR  
 Spécialité : sciences physiques  
 Etablissement  
 d'enseignement : Universite Joseph Fourier  
 Ville : Grenoble  
 Pays :  
 Date d'obtention  
 du diplôme : 28/02/2007

#### Expériences professionnelle

Nb total  
 d'années  
 d'expérience  
 pro. : 0

Nb d'années  
 d'expérience  
 dans le domaine  
 du poste :

Délai de  
 préavis : 0 mois

Employeurs :

Langues

Langue  
 maternelle : Néerlandais

Français :

Comprendre	Ecouter :	C2
	Lire :	C2
Parler	Prendre part à une conversation :	C2
	S'exprimer oralement en continu :	C2
Ecrire		C2

Anglais :

Comprendre	Ecouter :	C2
	Lire :	C2
Parler	Prendre part à une conversation :	C2
	S'exprimer	

**Allemand :**

	oralement en continu :	C2
	Ecrire	C2
Comprendre	Ecouter :	B2
	Lire :	C1
Parler	Prendre part à une conversation :	B1
	S'exprimer oralement en continu :	B1
	Ecrire	B1

**Autres langues :** non**Connaissances informatique****Connaissances de base :** PhP  
objective-C  
perl**Bonne connaissances :** tcl/tk  
bash  
javascript  
fortran**Très bonne connaissances :** C/C++  
MATLAB  
HTML**Expert :** Mathematica  
VHDL**Références****Nom :****Position :****Adresse,****Téléphone :****Peut-être  
contacté tout de suite :** non**Nom :****Position :****Adresse,****Téléphone :****Peut-être  
contacté tout de suite :** non**Nom :****Position :****Adresse,****Téléphone :****Peut-être  
contacté tout de suite :** non

**Patrick VAN ESCH**

12, rue Paul Vallier

38600 Fontaine

France

Tél.: 04 76 96 41 74

E-mail: [vanesch@ill.fr](mailto:vanesch@ill.fr)

Nationalité : Belge

45 ans, marié (épouse Française), père de deux enfants.

## FORMATION

**2007:** **Habilitation à Diriger des Recherches** – Université Joseph Fourier (Grenoble)

**1998 :** **Doctorat en Sciences** - Université Libre de Bruxelles (V.U.B)

*Thèse en physique des particules expérimentale sur la structure partonique du Pomeron dans le proton (et d'une thèse annexe sur une optimisation de la décomposition de la matrice de mesure en valeurs singulières dominantes) - avec la plus grande distinction*

**1993 :** **Maîtrise en Sciences Physiques expérimentales** - Bruxelles

*Mémoire en physique des particules expérimentale sur un bruit de fond statistique dans un échantillon d'interactions d'électrons et de protons - avec la plus grande distinction*

**1985-1990 :** **Ingénieur civil option électromécanique,**  
**spécialisations : physique appliquée (principale) et électronique (secondaire)** - Bruxelles

*Mémoire théorique sur l'identification des systèmes non-linéaires – avec grande distinction.*

(distinction = entre 14 et 16/20 ; grande distinction = entre 16 et 18 / 20 ; la plus grande distinction = > 18/20)

## LANGUES

**Néerlandais** : langue maternelle, **français** : parlé à la maison, **anglais** courant.

**Allemand** : convenable.

## EXPERIENCE PROFESSIONNELLE

Juin 2000 – Actuellement

**Ingénieur au sein du Service Détecteurs de Neutrons à l'Institut Laue-Langevin**

Développement du système de division de charge (application du principe physique et conception de l'électronique bas-bruit et numérique) et son implémentation dans plusieurs instruments.

Instrumentation, acquisition et programmation VHDL.

Simulations et calculs, développements électroniques, projets divers. Conseils.

Août 1999 – Mai 2000

**Chercheur FWO-Vlaanderen dans le cadre de DUBBLE – ESRF**

Tâche principale : **développement de l'instrumentation d'une station EXAFS**, étude d'achat d'un détecteur pour une station PX.

Réalisation spéciale : amplificateur faible bruit pour chambre d'ionisation et pilotage en auto-alignement des éléments optiques et la station EXAFS.

Nov 1998 – Juillet 1999

Assistant en électronique puis **Maître de conférences en électricité** à la **Hogeschool Gent** (Ecole d'Ingénieurs)

Titulaire des cours :

-**Simulation de circuits électroniques (SPICE)**

-**Mesures électroniques**

-**Physique des semi-conducteurs et technologie de fabrication**

-**Systèmes de haute tension**

Autres activités : TP de théorie de contrôle, d'électronique de base

Exercices d'électronique de base, d'électricité, de haute tension

Encadrement d'un étudiant en maîtrise sur l'application des lois de la mécanique classique dans des logiciels de réalité virtuelle.

Juil. 1997 à oct. 1998

**Ingénieur de recherche**

**Hewlett - Packard**

Membre d'une cellule de 4 chercheurs travaillant en collaboration avec le service d'électricité appliquée de l'Université Libre de Bruxelles.

Mission de la cellule : développer un **appareil de mesure du comportement non-linéaire de semi-conducteurs dans le domaine des micro-ondes**.

Tâche spécifique: développer des **méthodes mathématiques de modélisation et de simulation** de ces composants en utilisant des techniques algébriques de réduction de modèles et de modélisation en utilisant des **réseaux neuronaux**.

Intégration de ces méthodes dans l'instrumentation et le simulateur MDS.

Mars 1991 à juin 1997

**Chercheur-Thésard**

**Institut Inter – universitaire des Hautes Energies (I.I.H.E.) (Bruxelles)**

Contrat de thèse spécifique aux recherches nucléaires (I.I.K.W.) de 6 ans.

Membre de la Collaboration H1 autour du collisionneur positron - proton HERA appartenant au centre de recherche DESY à Hambourg .

- analyse de données dans le cadre de la préparation de la thèse.
- réalisation d'un projet de simulation d'une nouvelle partie du détecteur (détection de la position de passage d'un proton par fibres scintillantes)
- responsabilité technique de l'instrumentation des chambres proportionnelles « on call ».

AV

Patrick Van Esch  
SDN/DPT  
Institut Laue Langevin  
[vanesch@ill.eu](mailto:vanesch@ill.eu)  
tél: 76 87

Grenoble, 15 mars 2012

À :  
Monsieur M. Johnson, Chef du Service CS/DS

Objet : Offre d'emploi 12/03.

Monsieur,

Vous cherchez un collaborateur au sein du groupe C.S de l'ILL pour participer au projet NMI3 II : il s'agit d'évaluer des solutions pour le développement pour un logiciel d'analyse de données inter-centre (comme mantid) afin de développer le prototype de logiciel le plus approprié pour traiter les données expérimentales d'installations neutroniques. Pour cela, vous avez besoin d'un collaborateur qui a de l'expérience dans un environnement scientifique, qui possède des connaissances solides dans le calcul et le traitement de données, ainsi que dans les instruments neutroniques et leur problématique. Vous cherchez quelqu'un qui a aussi une expérience en programmation.

J'ai effectué à plusieurs reprises au sein du SDN des calculs, des traitements de données, d'images et de signaux, des simulations de processus physiques et diverses programmations informatiques. Cette expérience s'ajoute à celle acquise dans la modélisation mathématique au sein de HP au début de ma carrière et rejoint une partie de mon travail de HDR, de thèse, et de fin d'étude d'ingénieur. J'ai une bonne compréhension des problèmes de l'instrumentation neutronique (et à rayons X) grâce à ma mission au SDN et à mes échanges avec les responsables d'instruments.

Il me semble que mes compétences pourraient donc être mises avec profit au service du CS, dans le cadre de la fonction proposée. Ma motivation est d'autant plus vive que j'avais déjà exprimé le souhait de travailler au sein de votre équipe en avril 2010 dans le cadre d'une demande d'un changement de service.

Je me mets à votre disposition si vous souhaitez approfondir la pertinence de ma candidature et je vous prie d'agréer, Monsieur, l'expression de mes salutations distinguées.

Patrick Van Esch.

## Description de carrière de P. Van Esch

### **Antérieur à l'ILL.**

Je suis né le 30 janvier 1967 dans une commune de l'agglomération Bruxelloise. Après avoir suivi un enseignement secondaire néerlandophone (Sciences modernes, section mathématiques), j'ai été reçu premier au concours d'admission pour les études d'ingénieur civil à la « Vrije Universiteit Brussel » en 1985, où j'ai pris les options d'électronique et de physique appliquée (dans la section d'ingénieurs polytechniques en électromécanique).

Mon mémoire de fin d'étude portait sur un problème théorique en identification des systèmes non-linéaires : à savoir, quels sont les jeux de signaux d'excitation qui donneront lieu à une erreur statistique minimale sur des paramètres d'un modèle générateur d'harmoniques à estimer à partir de mesures contenant du bruit. Ce travail a été effectué sous la direction du professeur J. Schoukens. J'ai résolu ce problème dans mon mémoire – malheureusement, je n'ai pas pris la peine d'en écrire une publication.

En 1991, j'ai été accepté comme étudiant-doctorant avec un contrat de 6 ans dans l'Institut Inter-Universitaire des Hautes Energies, à Bruxelles, sous la direction du professeur Lemonne. En parallèle, j'ai fait les études de licence/maîtrise en physique expérimentale à la « Vrije Universiteit Brussel », maîtrise que j'ai obtenue en 1993 sur un mémoire sur des techniques d'estimation de bruit de fond statistique dans des échantillons d'événements.

Mon travail de thèse s'est effectué au sein d'une collaboration internationale de plusieurs centaines de physiciens et ingénieurs dans la physique des hautes énergies, appelé H1. Cette collaboration a construit, exploité et analysé les données d'un grand appareil expérimental situé dans l'institut DESY (Deutsches Elektronen SYNchrotron) à Hambourg (Allemagne) auprès du collisionneur de particules (positrons sur protons) HERA. Au début, mon travail était plutôt très technique, car il fallait bâtir, installer, câbler, programmer... une partie de cet appareil expérimental. Notre groupe était responsable de deux grands détecteurs MWPC cylindriques, ainsi que de l'électronique de lecture et d'acquisition de ces détecteurs et d'autres, construits par le PSI (Suisse) et RAL (UK). En parallèle, je faisais partie de certains groupes de travail d'analyse de données. De ces groupes de travail sont issus beaucoup de publications. En particulier, le groupe de travail sur les événements diffractifs m'a inspiré pour faire une analyse sur un jeu de données spécifique, à savoir des événements à grand gap diffractif. Ce sont des événements a priori étranges, car il y a une séparation angulaire sans particules détectées entre le « résidu » hadronique du proton incident et du parton interagissant, qui est statistiquement inexplicable. Dans le cas standard, les deux parties sont colorées et par confinement de la force de couleur, il devrait y avoir une corde gluonique entre les deux parties qui devrait générer des particules hadroniques – qui ne sont donc pas observées. L'idée était donc que ce n'était pas un simple parton avec lequel il y avait eu interaction, mais une structure plus complexe à l'intérieur du proton. Un candidat était le Pomeron. L'échantillon de ces événements pouvait alors peut-être servir pour établir si oui ou non, on pouvait extraire une fonction de structure du pomeron – c'est-à-dire si oui ou non une section efficace différentielle se factorisait ou non en deux facteurs. Dans ma thèse, j'ai imaginé des tests statistiques pour vérifier cette hypothèse, qui a finalement été rejetée par 2.8 déviations standard – ce qui est indicatif, mais ce qui n'est malheureusement pas conclusif, faute de nombre d'événements (dans la physique des hautes énergies, il faut par convention 5 déviations standard pour pouvoir affirmer un résultat). Un autre aspect de mon travail de

thèse consistait à participer à la construction d'un petit détecteur de particules, utilisé justement dans la détection d'événements diffractifs. Le principe était une combinaison de plaques et de fibres scintillantes, connectés à un jeu de photomultiplicateurs par des fibres optiques. Je me suis chargé de la simulation du comportement du détecteur (en particulier pour résoudre la question de savoir si des électrons delta pouvaient introduire un bruit de fond). Pendant la même période, j'étais responsable des travaux pratiques pour le cours de détection de particules, et des séances d'exercices allant avec les cours en licence et maîtrise sur la physique des particules élémentaires.

A l'université où j'ai défendu ma thèse, il fallait aussi une thèse-annexe sur un sujet séparé. Un groupe de recherche financé par Hewlett-Packard m'avait proposé un sujet qui était en fait dans la prolongation de mon travail de mémoire d'ingénieur : en utilisant une méthode d'estimation de paramètres du modèle d'un composant micro-ondes non-linéaire, l'algorithme standard utilisé posait des problèmes de stabilité numérique et de temps de calcul/espace mémoire. J'ai proposé une application de plusieurs techniques, essentiellement l'extraction de la matrice de mesure du « noyau intéressant » (décomposition RQ) et une estimation stabilisée en utilisant une décomposition en valeurs singulières dominantes – une technique qui payera aussi dans un tout autre contexte. Le succès de ce résultat m'a fait intégrer ce groupe de recherche Hewlett-Packard après mon travail de thèse<sup>1</sup>. Pendant mon séjour dans ce groupe (de 4 personnes y compris moi-même), ma tâche principale était de bâtir des modèles mathématiques des composants mesurés, et de développer un algorithme efficace qui puisse implémenter cela de façon automatique. Je me suis penché sur l'utilisation possible de réseaux neuronaux artificiels pour faire cela – ce qui a donné des résultats tout à fait satisfaisants. Comme pour une entreprise commerciale, la visibilité est très importante (et la divulgation d'informations plutôt à éviter), la priorité était donnée à des présentations dans des conférences, et non à la publication dans des revues scientifiques. J'ai présenté le travail sur les modèles à base de réseaux neuronaux au « International Workshop on Advanced Black Box Techniques for Non-linear modeling » à Louvain. J'ai participé à la rédaction d'autres présentations par mes collègues concernant mon travail. Nous étions dans les années « dot-com », et au sein de Hewlett-Packard, tout virait vers l'informatique à grand bénéfice rapide et la partie test et mesure dont nous faisions partie était en difficulté à cause de son long cycle de recherche et développement. J'ai décidé de quitter ce groupe avant qu'il ne soit dissout (ce qui est arrivé deux ans après mon départ).

J'ai enseigné pendant un an dans une école d'ingénieurs industriels (4 ans): d'abord quelques mois comme assistant en électronique, ensuite comme maître de conférences en électricité appliquée. J'étais titulaire des cours suivants :

- simulation des circuits électroniques (utilisation de simulateurs comme SPICE, plus le principe sur lequel ces simulateurs sont basés), en 3<sup>ème</sup> année.
  - mesures électroniques en 3<sup>ème</sup> année
  - physique des semi-conducteurs et technologie de fabrication en 4<sup>ème</sup> année
  - systèmes de distribution d'énergie électrique sous haute tension en 4<sup>ème</sup> année
- J'encadrais aussi des TP en théorie de contrôle (4<sup>ème</sup> année), et le laboratoire d'électronique de base (2<sup>ème</sup> année), ainsi que les exercices d'électricité (première année) et d'électronique (deuxième année).

---

<sup>1</sup> J'ai défendu mon travail en fait bien plus tard, pour deux raisons : la première était de nature purement administrative, la seconde tenait du fait qu'il s'est avéré difficile de trouver deux fois une date commune pour tous les membres du jury (défense à huis clos suivi, 3 mois plus tard, de défense publique) – ce qui a entraîné un décalage de près de 8 mois entre le dépôt de mon mémoire et la défense publique.

Finalement j'ai encadré un étudiant en maîtrise (informatique) sur l'application des lois de la mécanique classique en réalité virtuelle.

Bien que l'expérience d'enseignant fût très enrichissante, le manque total de possibilité de faire de la recherche – ainsi que des raisons familiales - m'ont fait accepter une proposition de la FWO-Vlaanderen (l'équivalent en Belgique du CNS en France) pour venir à Grenoble, à l'ESRF dans le cadre d'une CRG. Ma tâche était de développer un instrument EXAFS. Normalement, j'aurais dû aussi devenir le responsable scientifique de cette station, mais cela ne s'est pas fait comme convenu. J'ai donc quitté ce poste après 10 mois pour accepter un poste d'ingénieur de recherche en face, à l'institut Laue Langevin, dans le service « détecteurs de neutrons ». J'ai néanmoins réussi à rendre opérationnelle la station EXAFS avant mon départ avec une programmation du pilotage de l'optique (monochromateur, miroirs et banc optique contenant l'instrument EXAFS) en cherchant le maximum de flux mesuré dans l'espace des paramètres libres de la mécanique.

## A I'ILL

Une description de mon travail « créatif » jusqu'en 2006 peut être trouvée dans mon mémoire d'habilitation. Dans le descriptif qui suit, je me limite aux tâches qui peuvent avoir un intérêt dans le cadre du service de calcul scientifique.

Avec un étudiant, en 2007, nous avons programmé une simulation d'un détecteur hexagonal dans l'environnement MATLAB, ainsi qu'une analyse de données expérimentales sur un prototype de détecteur exploitant ce principe. L'idée originale basée sur une estimation analytique est décrite dans [1] et le but de la simulation et de la mesure était de vérifier ce modèle simplifié.

L'année suivante, avec un autre étudiant, une programmation on-line dans un FPGA du traitement a été faite, et couronnée de succès.

Après avoir suivi une formation au sein de l'INSTN sur des techniques Monte-Carlo comprenant une introduction à Tripoli, j'ai utilisé le logiciel de transport de particules Tripoli afin de calculer des corrections d'efficacité du détecteur de D22, suite à une demande du scientifique de l'instrument d'expliquer une déviation entre la correction appliquée et un résultat attendu. Cette simulation a permis de diminuer ce décalage de  $\pm 10\%$  à  $\pm 2\%$  aux bords de l'image. Il y a toujours une demande de la part du scientifique d'essayer de trouver une correction pour les derniers pourcentages, mais l'avancée a été appréciée. Il s'est avéré plus compliqué de traiter ce problème en McStas

J'ai programmé (essentiellement en Scilab et Matlab) différents aspects de détecteurs à couche de bore dans le cadre du développement de détecteurs de remplacement causé par la pénurie mondiale de He-3.

Dans le cadre de la programmation, j'ai repris un travail qui avait été fait partiellement par un étudiant-stagiaire mais qui n'avait pas abouti. Il s'agissait d'un mini-système d'acquisition de données, qui prenait les signaux d'un détecteur, et qui produisait une image sur ordinateur. Il y a plusieurs « couches » logicielles dans ce projet. D'abord il y a la programmation du FPGA de la carte électronique (programmation en VHDL). En suite, il y a une librairie DLL écrite en C qui communique avec le pilote du bus USB à laquelle la carte électronique est liée. Finalement, il y a l'application utilisateur écrite en Tcl/Tk. Comme je ne maîtrisais pas le Tcl/Tk, ce fut l'occasion de l'apprendre. Ce système est maintenant complètement fonctionnel et j'ai profité de l'occasion pour ajouter plusieurs fonctionnalités.



J'ai fait plusieurs projets mineurs de programmation en VHDL (langage de programmation de logique vu comme des processus parallèles qui communiquent par échange de signaux). J'ai réalisé un projet de plus grande taille où plusieurs FPGA communiquent entre eux pour le projet DIB – ce système fonctionne maintenant sur l'instrument. Je travaille en ce moment sur une extension de ce projet pour implémenter des algorithmes plus sophistiqués (bientôt avec un stagiaire).

Dans le cadre du projet Figaro, j'ai effectué une programmation en Scilab d'une analyse d'image de test afin de vérifier la stabilité de la calibration de ce détecteur.

J'ai aussi mis en ligne une petite application qui calcule l'efficacité théorique d'un détecteur à gaz, en tenant compte de la diffraction, diffusion et absorption de la fenêtre en Javascript <http://vaneschpc1.ill.fr> sur l'intranet.

L'année dernière, dans le cadre d'une étude de faisabilité, avec un étudiant stagiaire, nous avons utilisé Garfield pour simuler les paramètres de transport électronique et nous avons confronté ces simulations à des données expérimentales.

[1] Van Esch P. Multiple hits in wire chambers and other particle detectors.  
Journal of Instrumentation 2, P09004-1-P09004-15 (2007)

Fiche candidat

Pièces jointes

Suivi global

Suivi Postes

Banettes

  
Suivante

**Dossier candidat** n° ILL/06379    **CV**

**Date Création** 13/06/2009 01:40:00

**Identité**

**Type Candidat :** Externe

**Candidat :** M Fuentes-Montero Luis

**Titre :** Dr

**Date de naissance :** 05/07/1977

**Age :** 34

**Situation de famille:** marié ou vie maritale

**Enfants à charge:** 1

**Adresse :** Rinconada Sierra Blanca #4405

**Complément d'adresse :** Fraccionamiento Rinconadas de la Sierra

**Code postal :** 31125

**Ville :** Chihuahua

**Pays :** Mexique

**Nationalité :** Mexique

**2ème nationalité :** non

**Email :** luiso\_cub@yahoo.com

**Téléphone fixe :** +52 614 4125898

**Téléphone portable :**

**Téléphone professionnel :** ILL-ext - 7371

**Peut-il être contacté sur son lieu de travail :** oui

**Poste souhaité**

**Domaine d'activité :** Recherche

**Filière :** Informatique

**Emploi (recherché) :** INGENIEUR de RECHERCHE  
Calcul Scientifique  
Scientifique niveau Post-Doctoral  
en informatique cristallographique

**Emploi (affecté) :** Pas de métier renseigné.

**Formation et diplômes**

**Niveau de formation :** BAC >5

**Nom du diplôme :** Ph.D.

**Spécialité :** Materials Science

**Etablissement d'enseignement :** Advanced Materials Research Center (CIMAV)

**Ville :** Chihuahua

**Pays :** Mexique

**Date d'obtention  
du diplôme :** 20/12/2008

**Expériences professionnelle**

**Nb total  
d'années  
d'expérience  
pro. :** 2

**Nb d'années  
d'expérience  
dans le domaine  
du poste :** 0

**Délai de  
préavis :** 7 mois

**Employeurs :**

**Langues**

**Langue  
maternelle :** Spanish

**Français :**

Comprendre	Ecouter :	B2
	Lire :	B2
Parler	Prendre part à une conversation :	B1
	S'exprimer oralement en continu :	C1
Ecrire		B1

**Anglais :**

Comprendre	Ecouter :	C1
	Lire :	C1
Parler	Prendre part à une conversation :	C1
	S'exprimer oralement en continu :	C2
Ecrire		C1

**Allemand :**

Comprendre	Ecouter :	
	Lire :	
Parler	Prendre part à une conversation :	
	S'exprimer oralement en continu :	
Ecrire		

**Autres langues :** non

**Connaissances informatique**

**Connaissances  
de base :**

**Bonne  
connaissances :** Linux(Fedora and Ubuntu)  
scripts of "BASH"

**Très bonne  
connaissances :** MS Exel  
MS Word  
MS Powerpoint.

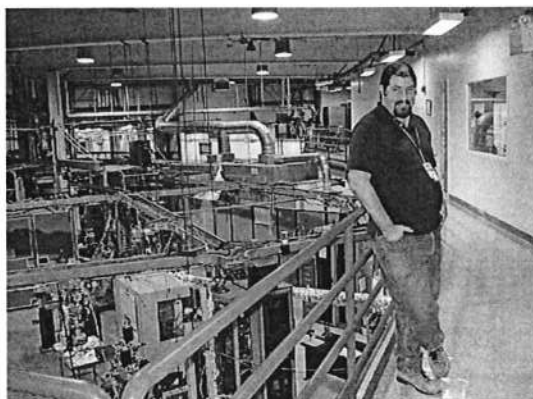
**Expert :** LibreOffice  
C++  
FORTRAN 95  
Visual Basic 6  
Winteracter  
CrysFML  
GTK-Fortran

**Références**

**Nom :** Alison Edwards

**Position :** Instrument Scientist for "Laue

## Resume



### Luis Fuentes-Montero, Ph. D.

Diffraction Group:  
Institut Laue-Langevin  
Grenoble, France

Bragg Institute  
Australian Nuclear Science and Technology Organization  
Lucas Heights N.S.W.

Email : fuentes-montero@ill.fr  
Mexican Passport # 06080036271

### Educational Background:

- B. Sc. in Topographic and Geodesic Systems.  
Autonomous University of Chihuahua, Chihuahua, Sept. 1999 - June 2002.
  - Maths, basic science and topography.
- M. Sc. in Materials Science  
Advanced Materials Research Center. Chihuahua, Jan. 2004 - Dec. 2005
  - Physics and chemistry of polymers, metals, ceramics and composites. Materials preparation and characterization.
  - Training at the Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL) on synchrotron radiation investigation of materials structure. Stanford-Berkeley Summer School on Synchrotron Radiation, SSRL, June 2005.
  - M. Sc. Dissertation: *A simplified Rietveld code for quantitative phase analysis*
- Ph. D. in Materials Science  
Advanced Materials Research Center. Chihuahua, Jan. 2006 – Dec. 2008
  - Computational Crystallography and Crystal Physics.
  - Diffraction/scattering measurements and software development at SSRL beamlines 2-1 (powder diffraction) and 11-3 (2D-scattering).
  - Ph.D. Thesis: *Software "Anaelu" for 2D-XRD modeling.*

**Skills:**

- Crystallographic software development. Visual basic and C++ (> 10 years experience).
- FORTRAN 9X & Winteracter. (> 2 year experience)
- Use of CrysFML (Crystallographic Fortran's Modules Library) (> 2 year experience)
- Powder XRD and grazing incidence scattering experiments at the Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (4 years experience).
- Laue neutron diffraction experiments with cylindrical detectors.(> 2 year experience)

**Professional Experience and present Occupation:**

- As field surveyor: "Sierra Azul" Building Co, Chihuahua: In charge of buildings field geometry (year 2003).
- As graduate (M. Sc. and Ph.D) student at CIMAV and SSRL: Development of synchrotron crystallography software packages (2004-2008). Please see Appendix 1.
- As post-doc at ILL and ANSTO (2009-present): Development of neutron diffraction software package ESMERALDA for similar diffractometers in Grenoble and Sydney. Please see Appendix 2.

**Prizes/Acknowledgements:**

- 1st National Prize in Computer Science. Olympiads of the Mexican Association of Engineering Students - Olympianeic 2000.
- 1st National Prize in Computer Science. Olympiads of the Mexican Association of Engineering Students - Olympianeic 2001.
- 2nd prize in posters competition. CIMAV 5<sup>th</sup> Congress. Chihuahua, Mexico 2008.

**Languages:****English:**

Speaking : Excellent - TOEFL score = 630 (Oct 2005)

Understanding, Reading : Excellent

Writing : Good

**French:**

Speaking Understanding, Reading: good

Writing : Average

**Spanish:**

Speaking, Writing, Understanding, Reading: Native

**Personal Interests:**

- Family (wife and 5-year old son)
- Scientific research: combination of geometry, atomic-level crystal physics and software development.
- Sports: archery, cycling

**Publications and Congress presentations List:**

1. M. García-Guaderrama, L. Fuentes-Montero, A. Rodriguez, L. Fuentes: "Structural Characterization of  $\text{Bi}_6\text{Ti}_3\text{Fe}_2\text{O}_{18}$  Obtained by Molten Salt Synthesis". *Integrated Ferroelectrics*, Vol. 83, pp. 41-47 (2006).
2. L. Fuentes-Montero, L. Fuentes: "Anaelu: a software for modeling Laue spots and Debye rings". 33<sup>rd</sup> Annual Stanford Synchrotron Radiation Laboratory Users Meeting. Contribution MAT-16 (2006).
3. M. Reyes-Cortés, M.E. Montero-Cabrera, M. Rentería-Villalobos, L. Fuentes-Montero, L. Fuentes-Cobas, E.F. Herrera-Peraza, H. Esparza Ponce, A. Rodríguez-Pineda: "Radioactive mineral samples from the northwest of Chihuahua City, Mexico". *Rev. Mexicana de Física* Vol. S53 (3) pp. 2328 (2007).
4. L. Fuentes-Montero, E. Torres, M.E. Montero, L. Fuentes: "A Simplified Rietveld Code for Quantitative Phase Analysis: Development, Test and Application to Uranium Minerals." *Rev. Mexicana de Física* Vol. S53 (3) pp. 108112 (2007).
5. L. Fuentes-Montero, M. E. Montero-Cabrera, L. Calzada, M. Pérez de la Rosa, O. Raymond, R. Font, M. García, M. Torres, A. Mehta, and L. Fuentes: "Synchrotron Techniques Applied to Ferroelectrics: Some Representative Cases". *Integrated Ferroelectrics* Vol. 101(1), pp. 101-113 (2008).
6. L. Fuentes-Montero, L. Fuentes: "Modeling of Texture Effect on 2D Diffraction Patterns". Linac Coherent Light Source and Stanford Synchrotron Radiation Laboratory Users Meeting and Workshops. Contribution MAT-19 (2008).
7. L. Fuentes-Montero, M. E. Montero-Cabrera, L. Fuentes: "The software package ANAELU for X-ray diffraction analysis using two-dimensional patterns" *Journal of Applied Crystallography* Vol. 44 pp. 241-246 (2011).
8. D.C. Burciaga-Valencia, C.G. Méndez, H. Esparza-Ponce, A.M. Beesley, M.T. Crespo, L. Fuentes-Cobas, L. Fuentes-Montero, M.E. Montero-Cabrera. "Synchrotron radiation study of the uranium chemical species electrodeposited for alpha spectrometry sources". *Rev. Mexicana de Física* S 57 (1) 21-29 (2011).
9. A. Muñoz-Romero, G. Aquino De Los Ríos, P. Domínguez-Barrera, L. Fuentes-Montero, J. Camarillo-Cisneros, H. Camacho-Montes, M. E. Fuentes-Montero, M. E. Montero-Cabrera, M. García-Guaderrama, L. Fuentes-Cobas. "From Nano to Bulk: Computer- and Synchrotron- Aided Investigation of the Structure-Properties Relationship". *Integrated Ferroelectrics* Vol. 125(1), pp. 61-72 (2011).
10. M. Sánchez del Río, E. García-Romero, M. Suárez, I. da Silva, L. Fuentes Montero, G. Martínez-Criado "Variability in sepiolite: Diffraction studies" *American Mineralogist* Vol. 96(10), pp. 1143-1454 (2011).
11. A. Muñoz-Romero, L. Fuentes-Montero, M.E. Montero-Cabrera, U. Trivedi, L.E. Fuentes-Cobas "Textured Multiferroics: 2-D Diffraction and Properties Prediction" *Materials Science Forum* Vols. 702-703 pp 1007-1010 (2012)

## References:

– Dr Alison Edwards ([aed@ansto.gov.au](mailto:aed@ansto.gov.au)) +61 (0)2 9717 7247  
Instrument Scientist for “Koala Laue diffractometer” at A.N.S.T.O.  
<http://www.ansto.gov.au/>

– Prof. Jesus Gonzalez ([jesus.gonzalez@cimav.edu.mx](mailto:jesus.gonzalez@cimav.edu.mx)) +52 614 4391172  
General Director of the “Advanced Materials Research Center” Chihuahua-Mexico “<http://www.cimav.edu.mx>”

Warm greetings Mark,

I am writing to express my interest in the position "ref. 12/03" as a Computational scientist. I provide arguments, based on my experience and achievements on scientific software development, in favour of my candidature.

As you might already know. I write software since I was 9 years old and I have continued programming during all my studies. My master degree project was a program that refines the shape and size of peaks of XRD data. My PhD research was a program that models 2-dimensional XRD patterns with incomplete Debye rings starting from the structure and texture of the sample. Nowadays I am developing a program that allows the interpretation of neutron Laue images.

Attached to my resume comes a short description of my two latest programs, the one that I did during my PhD and the one that I am developing now with Juan. I would with pleasure give a live demonstration about how both programs work.

I look forward to hearing from you.  
Thanks in advance

Luis Fuentes-Montero. (Luiso)



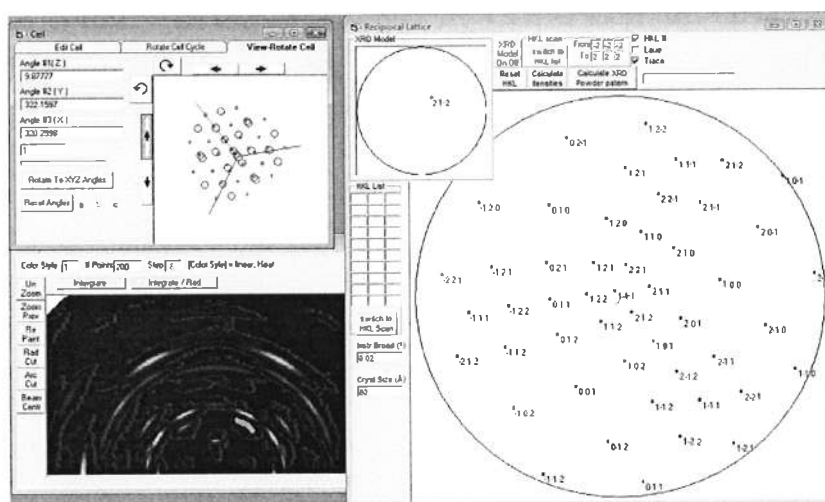
## APPENDIX 1 TO THE CV OF LUIS FUENTES-MONTERO

### Description of program “Anaelu” for modeling 2D-XRD of textured samples

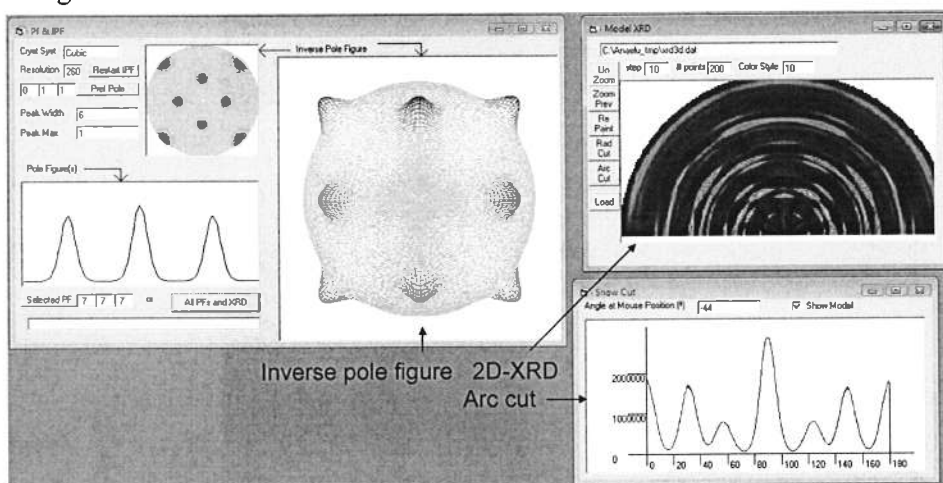
Anaelu user inputs the proposed crystal structure and texture parameters of the considered sample. The program displays several crystallographic features and predicts the two-dimensional x-ray diffraction (2D-XRD) pattern.

- Friendly unit cell input: The user enters the space group number, lattice parameters and asymmetric unit. “Anele” determines the coordinates of all the unit cell atoms and draws the unit cell and the stereographic projection.

- Crystal diffraction: The user drags the mouse over the unit cell and the program rotates it, calculates in real time the corresponding stereographic projection and predicts the single-crystal 2D-XRD spots.



Texture: The user chooses one or more preferred orientations. “Anaelu” generates the inverse pole figure (IPF), calculates all the necessary direct pole figures (PF) and finally models the XRD 2D pattern. The figure shows the IPF of a cubic sample with preferred {011} orientation, the calculated 2D-XRD and the intensity distribution (“arc cut”) along a Debye ring.



## **APPENDIX 2: MAIN FEATURES OF THE ESMERALDA PROGRAM (ILL – ANSTO: UNDER DEVELOPMENT)**

### **- Visualizations**

The program shows the experimental image in a friendly way. It has 4 different colour tables. The contrast is adjustable. It can be zoom any area by dragging the mouse pointer. It can show on real time a zoom of the area near the mouse pointer. Also is capable of showing an animated 3D view of any area.

### **- Finding peak tools**

The program has two algorithms for finding peaks automatically on the image. The peaks may be selected or unselected manually; the user may either way select all peaks manually or may start from one of the automatic algorithms and add or remove peaks manually. Also may adjust the parameters used to find peaks automatically.

### **- Orientation**

There are three ways for orienting the crystal with the program:

Rotation manually: The user may rotate a virtual single crystal, and the program will calculate in real time the Laue pattern and the stereographic projection of all visible reflections. So the user can try to make fit calculated and experimental pattern.

Like the finding peak tool, the programs also have two different automatic algorithms for orient the crystal, and also both have adjustable parameters.

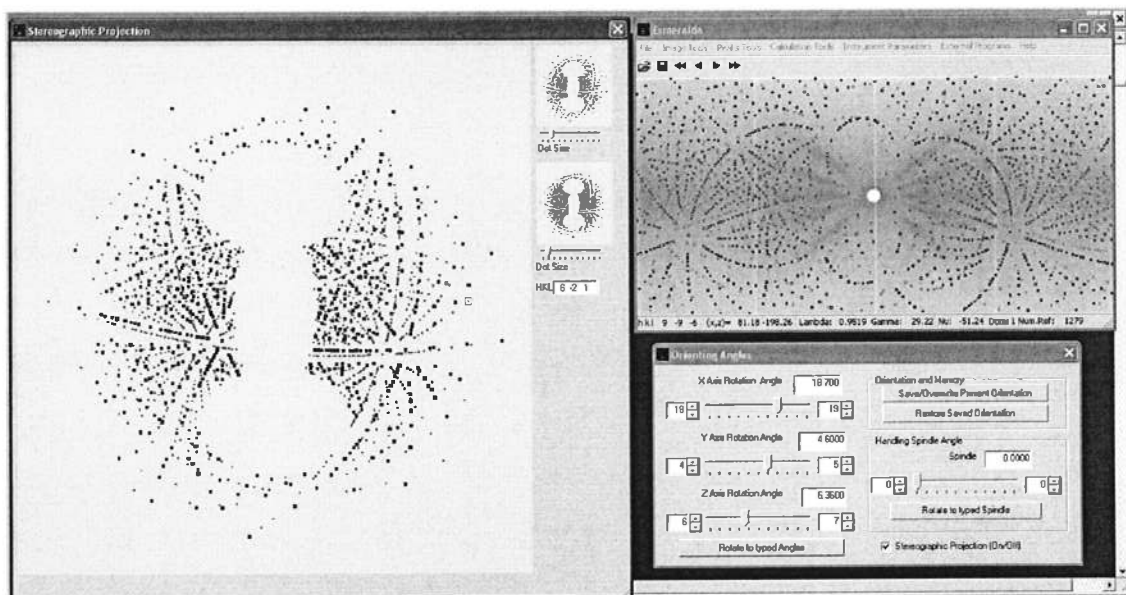
### **- Integration**

The program has two algorithms for integration of experimental peaks. They are both in developing process and there is still lot of testing to do

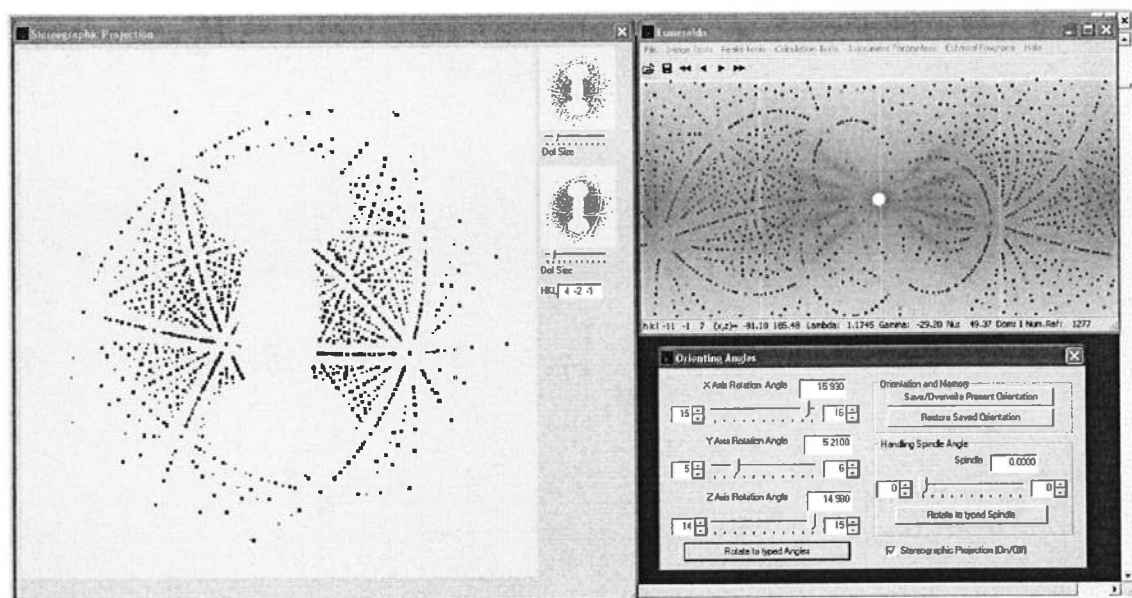
For a more detailed description feel free to ask for a live demonstration.

I will be glad to show how the program runs. Also a live demonstration could show much more than this document.

The next two images show the same Laue pattern treated by ESMERALDA with the same theoretical crystal structure, the only difference is that in the first image the crystal is not oriented and in the second it is oriented.



*Not oriented*



*Oriented*

Fiche candidat

Pièces jointes

Suivi global

Suivi Postes

Banettes

Précédente

Suivante

Dossier candidat n° ILL/11576



CV

Date Création 08/03/2012 11:48:00

## Identité

Type Candidat : Externe

Candidat : M Goret Gael

Titre : Dr

Date de naissance : 11/10/1983

Age : 28

Situation de famille: marié ou vie maritale

Enfants à charge: 1

Adresse : 8 Rue Expilly

Complément d'adresse :

Code postal : 38500

Ville : Voiron

Pays : France

Nationalité : France

2ème nationalité : non

Email : gael.goret@gmail.com

Téléphone fixe :

Téléphone portable : 0683826720

Téléphone professionnel : 0476882678

Peut-il être contacté sur son lieu de travail : oui

## Poste souhaité

Domaine d'activité : Recherche

Filière : Informatique

Emploi (recherché) : INGENIEUR de RECHERCHE  
Calcul Scientifique

Emploi (affecté) : Pas de métier renseigné.

## Formation et diplômes

Niveau de formation : BAC &gt;5

Nom du diplôme : PhD in Structural Biology – Nano-biology

Spécialité : flexible fitting of molecular models into 3D electron microscopy reconstruction

Etablissement d'enseignement : Institut de Biologie Structurale

Ville : Grenoble

**Pays :** France

**Date d'obtention  
du diplôme :** 26/09/2011

**Expériences professionnelle**

**Nb total  
d'années  
d'expérience  
pro. :** 4

**Nb d'années  
d'expérience  
dans le domaine  
du poste :**

**Délai de  
préavis :** 0 mois

**Employeurs :**

**Langues**

**Langue  
maternelle :** Français

**Anglais :**

Comprendre	Ecouter :	B1
	Lire :	B2
Parler	Prendre part à une conversation :	B2
	S'exprimer oralement en continu :	B2
	Ecrire	B1

**Allemand :**

Comprendre	Ecouter :	
	Lire :	
Parler	Prendre part à une conversation :	
	S'exprimer oralement en continu :	
	Ecrire	

**Autres langues :** non

**Connaissances informatique**

**Connaissances  
de base :** C/C++, Fortran

**Bonne  
connaissances :** Git, SVN, Eclipse, 3D Visualization (Vtk, OpenGL)

**Très bonne  
connaissances :** OOP, Scientific Computing, Gui development (Tk, Qt), Linux use

**Expert :** Understanding of complex problem, Python Programming

**Références**

**Nom :** Pr. Gilbert Deleage

**Position :** Head of IBCP (Lyon)

**Adresse,  
Téléphone :** gilbert.deleage@ibcp

**Peut-être  
contacté tout de  
suite :** oui

**Nom :** Dr Jorge Navaza

**Position :** Group Leader in IBS (Grenoble)

**Adresse,  
Téléphone :** jorge\_navaza@ehu.es

**Peut-être  
contacté tout de** oui

suite :

---

**Nom :** Dr Michael Krisch  
**Position :** Group Leader in ESRF (Grenoble)  
**Adresse, Téléphone :** krisch@esrf.fr, 04 7  
**Peut-être  
contacté tout de  
suite :** oui

# Gaël Goret

## PhD in Nano-biology

**Date of birth** : 11 October 1983  
**Nationality** : French  
**Gender** : Male

**Phone** : +33(0)6 83 82 67 20  
**Mail** : [gael.goret@gmail.com](mailto:gael.goret@gmail.com)  
[gael.goret@esrf.fr](mailto:gael.goret@esrf.fr)

### - Education

**2008-2011** : PhD in Structural Biology - Nano-biology, Laboratory of Structural Electron Microscopy, Institute of Structural Biology, Grenoble.

**2006-2008** : M.Sc. in Bioinformatics, Biostatistics and Genome, Claude Bernard University (UCBL), Lyon.

**2004-2006** : B.Sc. in Mathematics and Data Processing for Life Science, Claude Bernard University (UCBL), Lyon.

**2001-2004** : Preparatory School of Mathematics, EPITA, engineering school of computer science and advanced technologies, Paris.

### - Research Experience

**2011-2012** : ID28 BeamLine, Experimental Division, ESRF (European Radiation Synchrotron Facility), Grenoble (supervised by M. Krisch).

Development of methods and softwares dedicated to the analysis of data produce by IXS (Inelastic X-ray Scattering) and TDS (Thermal Diffuse Scattering). (1 year, end of contract 09/2012)

**2008-2011** : LMES (Laboratory of Structural Electron Microscopy), IBS (Institute of Structural Biology), CNRS-CEA-UJF, Grenoble (supervised by J. Navaza).

Development of methods and software for flexible fitting of molecular models into 3D electron microscopy reconstruction (Calculations performed in reciprocal-space, symmetry of the reconstruction taken into account) (3 years)-><http://mem.ibs.fr/VEDA>

**2007-2008** : LJC (Joliot-Curie Laboratory), ENS (Ecole Normale Supérieure), CNRS, Lyon (supervised by Y-H. Sanejouand).

Study of mechanical and energetical properties implied in catalytic process using normal mode analysis and elastic network models (9 months)

**2006-2007** : BISI (BioInformatics, Structures and Interactions), IBCP (Institute for the Biology and Chemistry of Proteins), CNRS, Lyon (supervised by G. Deleage).

Optimization of a secondary structure prediction method (Self Optimize Prediction Method) (6 months)

### - Skills

#### Expertise :

Scientific Computing, Structural/Nano Biology, Biophysics, Molecular Modeling, Programming, Software Development, Algorithmic, 3D Visualization, Linux, Open Source.

**Languages :**

French (mother tongue)  
English (fluent)

**Programming Languages :**

Intermediate : Pascal/Delphi, C/C++, CAML/OCAML, R  
Expert : Python

**- Publications**

- Desfosses A, **Goret G**, Farias Estrozi L, Ruigrok RW and Gutsche I  
Nucleoprotein-RNA orientation in the measles virus nucleocapsid by three-dimensional electron microscopy.  
*Journal of Virology* (2011) 85(3) : 1391-1395
- El Bakkouri M, Gutsche I, Kanjee U, Zhao B, Yu M, **Goret G**, Schoehn G, Burmeister WP and Houry WA  
Structure of RavA MoxR AAA+ protein reveals the design principles of a molecular cage modulating the inducible lysine decarboxylase activity.  
*Proceedings of the National Academy of Sciences* (2010) 107(52) : 22499-22504

**- Teaching Experience**

- Invited speaker in the EMBO course on Small Angle Neutron & X-ray Scattering from Proteins in Solution, lecture on the combined use of electron microscopy, small angle scattering and X-ray crystallography, EMBL, Grenoble, 2011 (1 hour)
- Instructor in the session B of the 21st HERCULES Course (biomolecular structure and dynamics), workshop on building models of macromolecular assemblies with VEDA, IBS, Grenoble, 2011 (1 day)
- Instructor in the EMBO course on the structural characterization of macromolecular complexes, practical workshop on fitting atomic models into electron microscopy reconstructions of macromolecular assemblies, EMBL, Grenoble, 2010 (6 half-days)
- Instructor in a practical workshop on macromolecular complexes modelling, Center for Structural Biochemistry (CBS), Montpellier, 2010 (1 day)

**- Additional Informations**

During university I have created and chair an association called ABIM (Association for BioInformatics and Mathematics) designed to promote interdisciplinary exchanges.



Dear Sir/Madam,

I am writing in response to the opening for a research engineer in programming announced in the ILL recruitment portal.

I am currently holding a software engineer position on the ID28 beam line of ESRF. I am working on the development of methods and softwares dedicated to the analysis of data produce by IXS (Inelastic X-ray Scattering) and TDS (Thermal Diffuse Scattering).

I worked previously, during my PhD, in the Laboratory of Structural Electron Microscopy (LMES) at the Institute of Structural Biology (IBS), Grenoble (France), under the supervision of Dr. Jorge Navaza ([jorge.navaza@ibs.fr](mailto:jorge.navaza@ibs.fr)).

During these 3 years I have developed methods and software for flexible fitting of molecular models into 3D electron microscopy reconstruction of macromolecular assemblies (<http://mem.ibs.fr/VEDA>).

The resulting program VEDA is an efficient 3D environment design to build models of macromolecular structure by combining high-resolution data from x-ray crystallography and 3D reconstruction data from electron microscopy.

These Last years I have completed my knowledge in applied-mathematics and programming with an extensive experience in computational science (structural biology, bio-physics, physics).

I am seeking a position in computational science to apply my skills and expand my experience.  
I would greatly appreciate the opportunity of joining your team.

Sincerely,

Gael Goret

--

Gael Goret, PhD  
Engineer / Dynamics and Extreme Conditions Group  
EXP Division / ESRF  
fixe : +33 476 882 678  
cell : +33 683 826 720

Fiche candidat

Pièces jointes

Suivi global

Suivi Postes

Banettes

Précédente

Suivante

**Dossier candidat** n° ILL/11624**CV****Date Création** 18/03/2012 17:08:00**Identité****Type Candidat :** Externe**Candidat :** M Roy Jérôme**Titre :** Dr**Date de naissance :** 22/11/1978**Age :** 33**Situation de famille:** autre situation**Enfants à charge:** 0**Adresse :** 8 cours Lafontaine**Complément d'adresse :****Code postal :** 38000**Ville :** Grenoble**Pays :** France**Nationalité :** France**2ème nationalité :** non**Email :** jerome.roy@esrf.fr**Téléphone fixe :****Téléphone portable :** 06.49.62.72.46**Téléphone professionnel :** 04.76.88.29.32**Peut-il être contacté sur son lieu de travail :** oui**Poste souhaité****Domaine d'activité :** Recherche**Filière :** Informatique**Emploi (recherché) :** INGENIEUR de RECHERCHE  
Calcul Scientifique**Emploi (affecté) :** Pas de métier renseigné.**Formation et diplômes****Niveau de formation :** BAC >5**Nom du diplôme :** PhD**Spécialité :** Condensed Matter**Etablissement d'enseignement :** Université Orsay**Ville :** Orsay**Pays :** France

Date d'obtention  
du diplôme : 01/05/2006

### Expériences professionnelle

Nb total  
d'années  
d'expérience  
pro. : 5

Nb d'années  
d'expérience  
dans le domaine  
du poste :

Délai de  
préavis : 0 mois

Employeurs :

### Langues

Langue  
maternelle : Français

Anglais :

Comprendre	Ecouter :	C1
	Lire :	C2
Parler	Prendre part à une conversation :	C2
	S'exprimer oralement en continu :	C1
Ecrire		C1

Allemand :

Comprendre	Ecouter :	B1
	Lire :	B1
Parler	Prendre part à une conversation :	A2
	S'exprimer oralement en continu :	A2
Ecrire		B1

Autres langues : non

### Connaissances informatique

Connaissances  
de base : \* C, Fortran  
\* Python GUI  
\*

Bonne  
connaissances : \* usual scientific softwares (spec.  
Origin, etc.)  
\* unix/linux shell (bash)  
\* linux system administration  
(debian)  
\* HTML

Très bonne  
connaissances : \* Python language and standard  
libraries (numpy, matplotlib, etc.)  
\* advanced editors (emacs, vim)

Expert :

### Références

Nom : Blanka Detlefs

Position : ID32 scientist

Adresse,  
Téléphone : ESRF phone: 27 76

Peut-être  
contacté tout de  
suite : oui

Nom : Claudio Ferrero

Position : Data Analysis Unit group leader

Adresse,  
Téléphone : ESRF phone: 23 70

## Jérôme ROY

Address : 8 cours Lafontaine  
38000 Grenoble FRANCE  
☎ 09 54 68 39 98  
✉ jerome.roy@esrf.fr

Born : Nov. 22, 1978  
Nationality : French  
Marital status : single

---

### Work experience

---

- 2010 – 2012 Junior Scientist position on a Long Term Project between ESRF and the Institute for Chemical and Bioengineering (ETH Zürich)  
- project dedicated to the studies of zeolite crystals by **X-Ray Standing Waves** technique  
- requiring **computer code** development for simulations and data fitting ;  
and technical developments in the **beamline optics** for micrometer-sized parallel beam
- 2007 – 2010 Post-doctoral position on ESRF ID32 beamline :  
- **surface diffraction** in UHV environment and electrochemical liquid/solid interfaces  
- UHV techniques (**STM, LEED, AES**) in the Surface Characterization Lab
- 2002 – 2006 **Structure, metallization and passivation of  $\beta$ -SiC (001) surface : atomic order at high temperature, effects of Deuterium, Indium and Nitrogen**  
Ph. D. in Commissariat à l'Énergie Atomique, Service de Physique et Chimie des Surfaces et Interfaces (DSM/DRECAM/SPCSI, CEA Saclay)

---

### Formation

---

- 2002 – 2006 **Ph.D. Student in Material Physics**  
*with honours* (Université Paris XI Orsay)
- 2001 – 2002 **M. Sc. in Solid Physics and Condensed Matter**  
(DEA Physique des Solides et de la Matière Condensée)  
*with honours* (Université Paris XI Orsay)
- 1998 – 2001 **École Centrale Paris**  
(top-ranking engineering school equivalent to university level in Mathematics and Physics specialised in engineering-training)  
Major in Material Physics
- 1996 – 1998 Intensive preparation for **competitive entrance examination** to university-level engineering schools
- 1996 **Scientific baccalauréat** equivalent to *A-level with distinction*

---

### Languages

---

- |                |   |
|----------------|---|
| <b>French</b>  | Native language   |
| <b>English</b> | Fluent, frequent use of english in working situations ( <i>TOEFL 2001</i> ) |
| <b>German</b>  | Good working knowledge  |

---

### Computing skills

---

- |                      |                                 |
|----------------------|---------------------------------|
| Scientific softwares | SPEC, Origin, Scilab            |
| Programming          | Python, shell, HTML, C, Fortran |
| Operating Systems    | Linux, Windows                  |

---

## Research expertise

---

- During the Long Term Project (2 years), working time divided (around 50% each) between :
  - beamtime preparations/experiment/data analysis, esp. work on beamline optics to obtain a  $5\mu\text{m}$  X-ray beam with controlled divergence and micrometer-sized samples mounting ;
  - and development of a computer code (Python package) pyXSW, stored on the EPN Campus forge, required to calculate zeolite crystal properties, simulate XSW signals and fit experimental data taking into account different physical effects (extinction factor, non-dipolar parameters) and various file formats (spec, EDF, HDF5)
- Previous personal research fields : studies of surfaces, interfaces and nanostructures deposition on semiconductors (Si, SiC) and metal oxides ( $\text{SrTiO}_3$ )
- Extensive UHV Techniques : Surface Diffraction (SXRD, LEED), Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy (STM/STS), Photoemission and Fluorescence spectroscopies (XPS, UPS, HAXPES, XFS), Standing-Waves (XSW), EXAFS, etc.
- Design, setup and intensive use of an experimental UHV-chambers (STM+LEED in CEA, new HAXPES setup in ESRF)
- During post-doc, daily use and maintenance of ID32 associated laboratories : Surface Characterization Lab (MBE or PLD layer deposition, surface studies with LEED, STM, AES) and Electrochemistry Lab
- Experience in synchrotron radiation as a user (ESRF BM32 (Grenoble, France), Elettra (Trieste, Italie)) and as a local contact (30% working time as post-doc in ESRF)
- Close support to ID32 trainees and PhD students
- Long-term collaborations with french (INPG Grenoble, CEA LIST, STMicroelectronics) and european institutes (ETH Zürich, London College (UK), Kiel and Ulm universities, Max-Planck-Institut Halle (Germany), Ioffe Institut(Russia))

---

## References

---

**Pr. Jeroen A. van Bokhoven**, ETH Institute for Chemical and Bioengineering – ☎ +41 44 632 5542 – ✉ jeroen.vanbokhoven@chem.ethz.ch  
**Dr. Blanka Detlefs**, ESRF – ☎ 04.76.88.27.76 – ✉ blanka.detlefs@esrf.fr  
**Dr. Claudio Ferrero**, ESRF – ☎ 04.76.88.23.70 – ✉ ferrero@esrf.fr  
**Dr. Jérôme Kieffer**, ESRF – ☎ 04.76.88.24.45 – ✉ jerome.kieffer@esrf.fr

---

## Refereed Publications

---

- **pyXSW, a software for X-Ray Standing Waves simulations and experiments fitting**  
J. Roy, J. Zegenhagen, and J. A. van Bokhoven  
to be submitted
- **A micrometer-sized collimated x-ray beam for standing wave experiments**  
J. Roy, T.-L. Lee, A. Snigirev, N. Danilina, S. Castelanelli, D. Gianolio, C. Lamberti, J. A. van Bokhoven and J. Zegenhagen  
to be submitted
- **Origin of resistivity change in NiO thin films studied by hard x-ray photoelectron spectroscopy**  
P. Calka, E. Martinez, D. Lafond, S. Minoret, S. Tirano, B. Detlefs, J. Roy, J. Zegenhagen, and C. Guedj  
*Journal of Applied Physics* **109**, 124507 (2011)
- **STM and LEED studies of  $\text{CaF}_2$  submonolayer coverage on Si(001)**  
S.M. Sutorin, N.S. Sokolov, J. Roy and J. Zegenhagen  
*Surface Science* **605**, 153 (2011)

- **X-ray standing waves and hard X-ray photoelectron spectroscopy at the insertion device beamline ID32**  
J. Zegenhagen, B. Detlefs, T.-L. Lee, S. Thiess, H. Isern, L. Petit, L. André, J. Roy, Y. Mi and I. Joumard  
*Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena* **178-179**, 258 (2010)
- **Wurtzite-type CoO nanocrystals in ultrathin ZnCoO films**  
H.L. Meyerheim, C. Tusche, A. Ernst, S. Ostanin, I.V. Maznichenko, K. Mohseni, N. Jedrecy, J. Zegenhagen, J. Roy, I. Mertig and J. Kirschner  
*Physical Review Letters* **102**, 156102 (2009)
- **On The Use Of Synchrotron Radiation For The Characterization Of "TiN/HfO<sub>2</sub>" Gate Stacks**  
C. Gaumer, E. Martinez, S. Lhostis, F. Fillot, P. Gergaud, B. Detlefs, J. Roy, Y. Mi, J.-P. Barnes, J. Zegenhagen and A. Chabli  
*Frontiers of Characterization and Metrology for Nanoelectronics Proceedings*, **1173**, 40 (2009)
- **Geometric structure of TiO<sub>2</sub>(011)(2×1)**  
X. Torrelles, G. Cabailh, R. Lindsay, O. Bikondoa, J. Roy, J. Zegenhagen, G. Teobaldi, W.A. Hofer and G. Thornton  
*Physical Review Letters* **101**, 185501 (2008)
- **From ultra-high vacuum to the electrochemical interface : X-ray scattering studies of model electrocatalysts**  
C.A. Lucas, M. Cormack, M.E. Gallagher, A. Brownrigg, P. Thompson, B. Fowler, Y. Gründer, J. Roy, V. Stamenkovic and N.M. Markovic  
*Faraday Discussions* **140**, 41 (2008)
- **Structure of the 3C-SiC(100) 5×2 surface reconstruction investigated by synchrotron radiation based grazing incidence X-ray diffraction**  
M.G. Silly, H. Enriquez, J. Roy, M. D'angelo, P. Soukiassian, T. Schuelli, M. Noblet and G. Renaud  
*Materials Science Forum* **556-557**, 533 (2007)
- **Isotopic effect in deuterium-induced semiconductor surface metallization : D/3C-SiC(100) 3×2**  
J. Roy, V.Yu. Aristov, C. Radtke, P. Jaffrennou, H. Enriquez, P. Soukiassian, P. Moras, C. Spezzani, C. Crotti and P. Perfetti  
*Applied Physics Letters* **89**, 042114 (2006)
- **Initial oxide/SiC interface formation on C-terminated 3C-SiC(100) c(2×2) and graphitic C-rich 3C-SiC(100) 1×1 surfaces**  
M.G. Silly, J. Roy, H. Enriquez, P. Soukiassian, C. Crotti and S. Fontana  
*Journal of Vacuum Science and Technology B* **22**, 2226 (2004)
- **Carbon terminated 3C-SiC(100) surface oxidation studied by high-resolution core level photo-emission spectroscopy using synchrotron radiation**  
J. Roy, M.G. Silly, H. Enriquez, P. Soukiassian, C. Crotti, S. Fontana and P. Perfetti  
*Materials Science Forum* **460**, 1325 (2004)

---

### Main International Conferences Communications

---

- |                 |   |
|-----------------|---|
| ECS-216 (2009)  | <b>Nanoscale aqueous dissolution of TiO<sub>2</sub>(110)(1×1)</b><br>X. Torrelles, G. Cabailh, R. Lindsay, O. Bikondoa, J. Roy, B. Detlefs, J. Zegenhagen and G. Thornton<br><i>216<sup>th</sup> Electrochemical Society meeting</i>  |
| GRC (2008)      | <b>Synchrotron X-ray surface diffraction study of Gold clusters deposited electrochemically on BDD</b><br>J. Roy, T.-L. Lee, P. Actis, S. Szunerits and J. Zegenhagen<br><i>Gordon Research Conference on Electrodeposition</i>   |
| ICFSI-10 (2005) | <b>Metallization of a Silicon Carbide Surface Using Deuterium</b><br>J. Roy, C. Radtke, P. Jaffrennou, V. Aristov, H. Enriquez, P. Soukiassian, C. Spezzani, P. Moras and P. Perfetti<br><i>10<sup>th</sup> International Conference on the Formation of Semiconductor Interfaces</i> |