



PhD position in theoretical molecular physics

Effects of non-adiabatic couplings and of rotation on dynamics: methodological development and applications to small systems

Institute of Physics of Rennes, France

Scientific context and research program

In molecular physical chemistry, experimental and observational data can be obtained with such high precision that more subtle effects become visible and discriminating. One example is the coupling between electron and nuclei motions, often neglected in many models, which now needs to be taken into account. For theory to remain a reliable predictive tool with a precision similar to that of experiment, it is crucial to go beyond the Born-Oppenheimer approximation by explicitly including the non-adiabatic couplings between multiple electronic surfaces. In the case of small molecules exhibiting Jahn-Teller effects, a major advance has been achieved recently through the use of diabatic models based on artificial neural networks. This approach has proven to be particularly accurate and efficient for the interpretation of the photodetachment spectra of NO_3^- . The challenge for a more detailed understanding of molecular systems with non-adiabatic couplings is now to include the overall rotation in the theoretical description.

The proposed research program contains both a numerical development aspect based on in-house computer codes, together with applications to various systems of interest. The main part of the work will be to implement diabatic models with an appropriate analytical form for further studies such as time-dependent dynamics (wave-packet propagation) or time-independent close-coupling approaches for scattering. Applications will include extending the study of the NO_3 radical, the ro-vibrational spectroscopy of which will also be the object of experimental work in the department. A second application will concern spectral line profiles modified by collisions in systems such as $\text{HCl}+\text{He}$ and $\text{Br}+\text{O}$.

The successful candidate will join the [molecular physics department of the Institute of Physics of Rennes \(IPR\)](#). He/she will benefit from various support actions provided by the IPR in a stimulating research environment, and will participate in international collaborations, in particular with groups in Bielefeld (Germany) and Torun (Poland), as well as via two International Research Networks, IRN MCTDH & IRN QUADMARTS.

Requirements

- Masters degree in physical-chemistry, theoretical chemistry, physics, or equivalent.
- Solid foundation in physical and theoretical chemistry.
- Experience with abstract algorithms and their numerical implementation.
- A good level of English.
- Tenacity and rigor.

In addition, familiarity with a UNIX/Linux working environment, Fortran programming, a solid mathematical background, and experience with numerical quantum chemistry would be advantageous.

Application procedure

Applications should be sent to Alexandra Viel (alexandra.viel@univ-rennes1.fr). They should include a CV demonstrating that the candidate has the necessary skills and experience for the project. The letter of motivation should mention any training the candidate feels he/she might require in order to best tackle the project. A detailed summary of the candidate's master thesis and the contact details of two referees must be provided.

The closing date for applications is 14th of April 2023. The candidate should receive feedback and/or a request for an interview in May 2023. The position will start in October 2023.



Financement de thèse en physique moléculaire théorique

Effets des couplages non-adiabatiques et de la rotation sur la dynamique: développement méthodologique et applications à des petits systèmes

Institut de Physique de Rennes, France

Contexte scientifique et programme de recherche

En physico-chimie moléculaire, les données expérimentales et observationnelles atteignent un tel niveau de précision que des effets subtils deviennent détectables et discriminants. Parmi ces effets, les couplages entre le mouvement des électrons et ceux des noyaux, souvent négligés dans beaucoup d'approches théoriques, doivent désormais être pris en compte. Pour que la théorie reste un outil prédictif de qualité avec une précision équivalente aux expériences, il est nécessaire d'aller au delà de l'approximation de Born-Oppenheimer en incluant explicitement les coupages non-adiabatiques entre plusieurs surfaces de potentiel. Récemment, l'utilisation de modèles diabatiques précis et reposant sur l'utilisation de réseaux de neurones artificiels a permis une avancée majeure dans l'étude multi-surfaces de petites molécules présentant des couplages de type Jahn-Teller. L'approche s'est en particulier montrée performante pour l'interprétation de spectres de photo-détachement de NO_3^- . Pour pouvoir obtenir une compréhension encore plus détaillée des systèmes, le défi est désormais d'inclure la rotation d'ensemble dans la description théorique.

Le programme de la thèse contient un volet de développements numériques s'appuyant sur les approches et programmes "maison" pour y intégrer la rotation d'ensemble, ainsi qu'un volet plus applicatif. Le cœur du travail est la mise en place de modèles diabatiques devant être représentés sous une forme analytique optimale pour l'étude de la dynamique dépendante du temps (propagation de paquets d'ondes) ou pour le traitement de la collision par la méthode de la résolution des équations couplées (Close Coupling). Deux domaines d'application sont envisagés. Le premier concerne la poursuite de l'étude NO_3 , radical dont la spectroscopie ro-vibrationnelle est également un projet expérimentaux du département. La deuxième concerne les problématiques d'élargissements de raies spectrales induites par collisions pour des systèmes tels que $\text{HCl}+\text{He}$ et $\text{Br}+\text{O}$.

Le candidat sera intégré au [département de physique moléculaire de l'Institut de Physique de Rennes](#) (IPR). Il bénéficiera des actions de soutiens des doctorants du laboratoire et de son environnement stimulant. Le projet contient une composante internationale via des collaborations avec les groupes de Bielefeld (Allemagne) et de Torun (Pologne) ainsi que les deux International Research Networks (IRN), MCTDH et QUADMARTS.

Compétences requises

- Diplôme de master en physique-chimie, chimie théorique, physique ou équivalent.
- Formation solide en physique et chimie théorique.
- Aptitude à la compréhension d'algorithmes abstraits et à leur implémentation numérique.
- Anglais.
- Ténacité et rigueur.

De plus, des compétences en travail sous UNIX/Linux, en programmation Fortran, en mathématiques et en calcul de structure électronique seront appréciées.

Procédure pour postuler

Les candidatures sont à envoyées à Alexandra Viel (alexandra.viel@univ-rennes1.fr). Elles comporteront un CV mettant en évidence les compétences nécessaires au projet et une lettre de motivation soulignant les besoins de formations complémentaires pour aborder cette thèse. Une description précise et concise du stage de Master est attendue. Les contacts de deux référents (si possible stage et responsable de M2) sont à fournir.

Les candidatures sont ouvertes jusqu'au 14 avril 2023. Les retours aux candidats et auditions éventuelles seront en mai 2023. Le démarrage de la thèse est prévu pour octobre 2023.