



Factorisation exacte pour la dynamique non-adiabatique à plusieurs dimensions

LPCT (Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques), UMR CNRS 7019, Université de Lorraine, Metz

Contexte scientifique et programme de recherche

Dans le domaine de la physique moléculaire, la dynamique non-adiabatique des états excités revêt un intérêt pour des applications variées, de la biologie à la science des matériaux. L'utilisation d'outils numériques pour la modélisation de ces processus implique des méthodes approximées, notamment l'approche surface-hopping, qui permet de traiter des systèmes à plusieurs dimensions mais intrinsèquement implique des approximations qui limitent l'interprétation des phénomènes quantiques.

Pour surmonter ces limites, l'algorithme Generalised-Coupled Trajectory-Mixed Quantum Classical (G-CT-MQC), basé sur la théorie de la factorisation exacte, émerge comme une approche prometteuse. Dans l'état actuel, l'application de l'algorithme G-CT-MQC reste cependant encore limité à des systèmes modèles à une ou deux dimensions, en raison des contraintes computationnelles. Dans ce projet de recherche, nous visons à développer et étendre le domaine d'application de cet algorithme pour étudier la dynamique des états excités des systèmes moléculaires à plusieurs dimensions. Pour valider nos développements méthodologiques, nous envisageons de les appliquer à la réaction de collision entre l'éthylène (C_2H_4) et l'atome d'oxygène $O(^3P)$. Il s'agit d'une réaction importante dans le contexte de la combustion et de la chimie atmosphérique. Les résultats de l'algorithme G-CT-MQC serviront de référence précise pour guider l'amélioration des approximations dans le cadre des méthodes de surface-hopping, visant à affiner les modèles tout en préservant l'efficacité computationnelle.

Ce projet de recherche nous permettra de mieux comprendre les mécanismes fondamentaux régissant la réactivité chimique à l'échelle moléculaire, ouvrant la voie à des applications innovantes dans différents domaines, tels que la conception de nouveaux matériaux, l'optimisation de processus industriels et la protection de l'environnement. Le projet, qui se trouve à l'interface de la physique moléculaire et de la chimie quantique, et qui s'appuie sur l'outil mathématique et informatique, s'adresse à un(e) candidat(e) motivé(e) avec une formation en physique ou en chimie quantique.

Compétences requises

- Diplôme de master en chimie théorique, physique ou équivalent
- Expérience en programmation en Fortran et Python
- Maîtrise de l'anglais

De plus, une expertise en calcul de structure électronique et dynamique non-adiabatique, ainsi que des compétences en travail sous UNIX/Linux, seront appréciées.

Procédure pour postuler

Le dossier de candidature doit être adressé à Francesco Talotta (francesco.talotta@univ-lorraine.fr) et/ou Lorenzo Ugo Ancarani (ugo.ancarani@univ-lorraine.fr). Il doit inclure un CV mettant en lumière les compétences requises pour le projet, ainsi qu'une lettre de motivation, et une description précise et concise du stage de Master. Les coordonnées des référents du stage M2 et du responsable de M2 doivent être fournies. La période de réception des candidatures s'étend jusqu'au 15 mai 2024. Les réponses aux candidats et les éventuelles auditions se dérouleront en mai/juin 2024.



Exact Factorization for Multi-dimensional Non-adiabatic Dynamics

LPCT (Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques), UMR CNRS 7019, Université de Lorraine, Metz

Scientific context and research program

In molecular physics, non-adiabatic dynamic processes involving excited states are of great interest in different fields, such as biology, electronics, and optically-active material science. Due to their inherent complexity, the thorough understanding of the quantum effects related to these phenomena is very challenging. Available numerical tools for modeling these processes make use of approximate methods, such as the surface-hopping approach, which enable the treatment of multidimensional systems but inherently involve approximations that limit the interpretation of quantum phenomena.

To overcome these limitations, the hybrid quantum-classical approach called Generalised-Coupled Trajectory-Mixed Quantum Classical (G-CT-MQC) based on exact factorization theory emerges as a promising lead. Currently, the application of the G-CT-MQC algorithm is limited to model systems with one or two dimensions due to a high computational cost. In this research project, we aim to develop and extend the application of G-CT-MQC to study the non-dynamics dynamic properties of the excited states in multidimensional molecular systems. To validate our methodological developments, we plan to apply the G-CT-MQC algorithm to the collision reaction between ethylene (C_2H_4) and the oxygen atom $O(^3P)$, an important reaction in the context of combustion and atmospheric chemistry. The results will serve as an accurate reference to guide the improvement of approximations for the surface-hopping methods, aiming to refine the algorithm while preserving the computational efficiency.

This research project will enhance our understanding of the fundamental mechanisms governing chemical reactivity at the molecular scale, paving the way for innovative applications in various fields such as new materials design, optimization of industrial processes, and environmental protection. Situated at the interface of molecular physics and quantum chemistry, and relying on mathematical and computational tools, this ambitious research project is intended for a motivated candidate with a background in physics or quantum chemistry.

Required Skills

- Master degree in theoretical chemistry, physics, or equivalent
- Expertise in Fortran and Python programming languages
- Good level in English language

Expertise in electronic structure calculation and non-adiabatic dynamics, as well as experience of working in a UNIX/Linux environment, will be appreciated.

Application Procedure

Applications should be submitted to Francesco Talotta (francesco.talotta@univ-lorraine.fr) and/or Lorenzo Ugo Ancarani (ugo.ancarani@univ-lorraine.fr). They must include a CV highlighting the skills required for the research project, along with a motivation letter and a description of the Master's internship. Contact details of the M2 internship supervisor should be provided. The application period extends until May 15, 2024. Responses to the candidates and potential interviews will take place in May/June 2024.