
[English version on the following page.]

Titre de la these: Méthodes de trajectoires quantiques pour les systèmes quantiques ouverts

Direction de these : Mario Barbatti – Aix Marseille Université, CNRS, Institut de Chimie Radicalaire (ICR), UMR 7273, ED 250

Co-direction : Fabienne Michelini – Aix Marseille Université, CNRS, Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence (IM2NP), UMR 7334, ED 353

Résumé du projet

Cette thèse se situe à l'interface de la chimie théorique, de la physique chimique et de la physique computationnelle. Elle porte sur le développement de méthodes de trajectoires quantiques pour les systèmes quantiques ouverts, avec un accent particulier sur les dynamiques de type Lindblad, les méthodes stochastiques de fonction d'onde, et la mise au point d'outils de simulation efficaces et extensibles. Le projet vise à construire un pont méthodologique entre, d'une part, des Hamiltoniens issus d'une description microscopique et, d'autre part, des modèles réduits adaptés à la simulation de systèmes ouverts à plus grande échelle.

Une part importante du travail consistera à développer un moteur de dynamique haute performance pour la propagation de trajectoires quantiques, avec un fort volet de développement logiciel scientifique. La thèse comportera donc une dimension marquée de codage, d'implémentation numérique, de validation, de benchmarking et de calcul haute performance.

Le projet est interdisciplinaire par nature, à la croisée de la chimie théorique et de la modélisation de systèmes quantiques ouverts orientée dispositifs. Il s'inscrit dans une collaboration entre l'ICR et l'IM2NP, avec co-encadrement entre les ED 250 et 353.

Profil recherché

Le ou la candidate devra avoir une solide formation en physique, chimie théorique, mathématiques appliquées ou discipline proche. Une bonne maîtrise de la mécanique quantique, des méthodes numériques et de l'algèbre linéaire est attendue. Un goût prononcé pour la programmation scientifique et le développement de méthodes computationnelles est indispensable. Une expérience en Fortran, calcul parallèle, systèmes quantiques ouverts, équations différentielles stochastiques ou calcul scientifique sera appréciée.

Candidature

Les candidats intéressés sont invités à prendre contact avec Mario Barbatti et à envoyer :

- un CV,
- une lettre de motivation,
- les relevés de notes,
- le nom et les coordonnées d'au moins un référent.

Les candidats présélectionnés pourront être invités à un entretien et devront ensuite fournir une lettre de recommandation pour le dossier final. La sélection finale est prévue en juin 2026.

Contacts

Mario Barbatti – mario.barbatti@univ-amu.fr

Fabienne Michelini – fabienne.michelini@univ-amu.fr

PhD Title: Quantum Trajectory Methods for Open Quantum Systems

Principal Supervisor: Mario Barbatti – Aix Marseille University, CNRS, Institut de Chimie Radicalaire (ICR), UMR 7273, ED 250

Co-supervisor: Fabienne Michelini – Aix Marseille University, CNRS, Institut Matériaux Microélectronique Nanosciences de Provence (IM2NP), UMR 7334, ED 353

Project Description

This PhD project lies at the interface of theoretical chemistry, chemical physics, and computational physics. It focuses on the development of quantum trajectory methods for open quantum systems, with particular emphasis on Lindblad dynamics, stochastic wavefunction approaches, and the design of efficient and extensible simulation tools. The objective is to build a methodological bridge between microscopically grounded Hamiltonians and scalable reduced models for open-system dynamics.

A major part of the work will consist of developing a high-performance trajectory engine for the propagation of open quantum dynamics, with a strong component of scientific software development. The project is therefore highly coding-oriented and will involve numerical implementation, validation, benchmarking, and high-performance computing.

The project is inherently interdisciplinary, at the crossroads of theoretical chemistry and device-oriented modeling of open quantum systems. It is based on a collaboration between ICR and IM2NP, with joint supervision across doctoral schools ED 250 and ED 353.

Candidate Profile

Applicants should have a strong background in physics, theoretical chemistry, applied mathematics, or a related field. A solid command of quantum mechanics, numerical methods, and linear algebra is expected. A strong interest in scientific programming and computational method development is essential. Experience with Fortran, parallel computing, open quantum systems, stochastic differential equations, or scientific computing will be considered an asset.

Application

Interested candidates are invited to contact Mario Barbatti and send:

- a CV,
- a letter of motivation,
- academic transcripts,
- the name and contact details of at least one referee.

Shortlisted candidates may be invited to an interview and will later be asked to provide a recommendation letter for the final application file. Final selection is expected in June 2026.

Contact

Mario Barbatti – mario.barbatti@univ-amu.fr

Fabienne Michelini – fabienne.michelini@univ-amu.fr