



## Éditorial :

La décision de mettre en place un bulletin mensuel du GDR THEMES a été prise lors de la première réunion du comité scientifique du GDR renouvelé le 30 Mars dernier à Paris. Il ne se substitue pas au site web ([www.gdr-thems.cnrs.fr/](http://www.gdr-thems.cnrs.fr/)) que vous pourrez continuer à consulter régulièrement mais il se fixe comme objectif de répercuter toutes les informations du mois que vous souhaitez faire connaître aux membres du GDR. C'est pourquoi un comité éditorial constitué de correspondants de chacune des thématiques s'est mis en place sur la base du volontariat. Vos correspondants du bulletin dans chacune des thématiques du GDR sont les suivant :

\* Thème 1: Systèmes moléculaires isolés

Arnaud Leclerc : [arnaud.leclerc@univ-lorraine.fr](mailto:arnaud.leclerc@univ-lorraine.fr)

\* Thème 2: Systèmes moléculaires en présence de champs intenses

Osman Atabek: [osman.atabek@u-psud.fr](mailto:osman.atabek@u-psud.fr)

Dominique Sugny : [Dominique.Sugny@u-bourgogne.fr](mailto:Dominique.Sugny@u-bourgogne.fr)

\* Thème 3: Systèmes moléculaires environnés

Sabine Morisset: [Sabine.Morisset@u-psud.fr](mailto:Sabine.Morisset@u-psud.fr)

Il vous est donc suggéré de leur faire parvenir toute information que vous estimerez intéressante pour la communauté et qui seront regroupées dans les rubriques suivantes :

### 1. Dernières nouvelles du GDR

- Offre de financement de congrès
- Offres de déplacements et rapports de visites
- Publications récentes et Soutenance de thèse ou d'habilitation
- Offres de thèse et de post doc ainsi qu'Ouvertures de postes permanents

- Possibilité d'utiliser le bulletin pour tous les membres du GDR qui cherchent des compétences dans un domaine donné pour les demander.

## 2. En dehors du GDR (et au delà) :

- Annonces de Congrès d'écoles d'été ou de workshop
- Appels d'offres de financement dans des domaines du GDR:  
PCMI,....

# Bulletin du mois de Mai 2017

## 1. Dernières nouvelles du GDR

\* Les **Journées Scientifiques du GDR Thèmes** se tiendront les **16 et 17 novembre 2017 à Metz**. Réservez la date dès à présent. L'appel à contributions sera lancé prochainement.

### \* APPEL d'OFFRES 2017 pour le soutien aux conférences

En 2017, le GDR THEMS propose de soutenir quelques conférences se tenant en 2017 en France, traitant des thématiques d'intérêt pour le GDR.

**La date limite de la demande est fixée au 5 mai 2017.**

Merci d'adresser vos demandes à [olivier.dulieu@u-psud.fr](mailto:olivier.dulieu@u-psud.fr), [thierry.stoecklin@u-bordeaux.fr](mailto:thierry.stoecklin@u-bordeaux.fr), [Nadine.Halberstadt@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:Nadine.Halberstadt@irsamc.ups-tlse.fr) en renseignant les points suivants :

- Nom de la conférence, dates, lieu, comité d'organisation et comité scientifique
- Programme de la conférence,
- Justification de la demande en lien avec les thématiques de THEMS, et indications sur la participation éventuelle de membres du GDR dans le programme scientifique.

Le GDR THEMS s'aligne sur la position officielle de la Société Française de Physique ([https://www.sfpnet.fr/la-sfp-s-engage-pour-les-femmes-en-](https://www.sfpnet.fr/la-sfp-s-engage-pour-les-femmes-en)

physique ): une attention particulière sera apportée à l'équilibre femmes-hommes parmi les personnes invitées à parler.

Les demandes seront traitées rapidement et les réponses adressées dans le courant du mois de mai 2017.

Si la conférence est sélectionnée pour un soutien, le logo du GDR devra figurer sur le site web de la conférence, et sur le programme et le recueil des résumés distribués aux participants.

### **\* APPEL d'OFFRES 2017 pour des visites entre équipes du GDR THEMES**

En 2017, le GDR THEMES propose de financer quelques visites de travail individuelles entre équipes du GDR pour favoriser les collaborations.

Les visites consistant à établir de nouvelles collaborations seront privilégiées. Les visites de jeunes chercheurs sont particulièrement encouragées. Dans la mesure du possible, il est souhaitable que la personne invitée profite de la visite pour présenter un séminaire. Un rapport succinct sera demandé à l'issue de chaque visite. Le GDR THEMES devra être remercié dans les publications qui résulteront de cette collaboration.

**La date limite de la demande est fixée au 5 mai 2017.**

Merci d'adresser vos demandes à [olivier.dulieu@u-psud.fr](mailto:olivier.dulieu@u-psud.fr), en renseignant les points suivants : -Nom et prénom, statut, laboratoire/équipe d'appartenance ; - Laboratoire/équipe à visiter, et correspondant-e dans cette équipe ; - Court descriptif scientifique de la collaboration et résultats attendus.

Les demandes seront traitées rapidement de sorte que les réponses devraient être adressées aux demandeurs dans le courant du mois de mai 2017.

### **\* Offres de thèses Thème 1 :**

Plusieurs sujets de thèse sont mis au concours en Lorraine au laboratoire SRSMC, UMR 7565, en particulier :

"Towards a quantum description of complex systems using sets of localized orbitals as electronic bricks", Directeurs : Manuel F. Ruiz-López et Alessandro Genoni

"Applications de bases Sturmiennes moléculaires à des processus de collisions",  
Directeurs : Ugo Ancarani et Arnaud Leclerc

Date limite de candidature : 10 mai. Plus de détails et d'autres sujets ici :  
<http://sesames.univ-lorraine.fr/> onglet "propositions de thèses".

## 2. En dehors du GDR:

### Congrès , Ecoles et Colloques

\* Ecole CECAM à l'Université Paul Sabatier à Toulouse du 25 au 30 Juin organisé par Nadine Halberstadt Manuel Barranco and François Coppens

" Dopant Dynamics in Superfluid helium-4 Nanodroplets: from Statics to Time-Dependent He-DFT"

\* Pour rappel, la 24e édition du congrès général de la Société Française de Physique aura lieu à Orsay du 3 au 7 juillet.

Inscriptions, dépôts et programme scientifique sur [www.sfp2017.fr](http://www.sfp2017.fr)

### Thème 2:

\* Ecole Thématique théorique: "**Modélisation en physico-chimie : de la phase gazeuse vers la phase condensée**" qui se tiendra du **9 au 13 octobre 2017** au Centre Blaise Pascal (Ecole Normale Supérieure, Lyon), sur 4 journées et demi.

\* Colloque dans le cadre du congrès général de la SFP à Orsay du 3 au 7 juillet 2017

### Cohérence et contrôle quantiques: des Fondamentaux aux Applications

Le contrôle quantique est un domaine en plein développement dont l'objectif est de manipuler finement, à l'échelle quantique, des atomes et des molécules pour contrôler leurs réactions chimiques, les aligner et refroidir, en faire des qubits pour des ordinateurs quantiques, améliorer les images des IRM, ou encore faire interférer les ondes de matière pour réaliser des mesures de précision. Ce colloque a pour objectif de présenter à travers trois sous-

colloques les avancées majeures de ce domaine de recherche.

**Trois sous-colloques sont proposés:**

- Interférométrie atomique (organisé par Bess Fang)
- Systèmes Quantiques Ouverts (organisé par Dominique Sugny, Osman Atabek et Michèle Desouter)
- Matière Froide (organisé par Nadia Bouloufa, Goulven Quéméner, Maxence Lepers)

**Thème 3 :**

\* Energetic Processing of Large Molecules and Interstellar Dust, 12-16 juin 2017, Toulouse: <https://epolm3-nanocosm.sciencesconf.org/>

\* International Workshop on Quantum Reactive Scattering 3-6 juillet 2017, Trieste Italie : <http://www.chm.unipg.it/chimgen/mb/theo2/QRS-2017/>

\* International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC), 19-22 Juin 2017, Torun, Pologne : <http://imampc2017.fizyka.umk.pl/>

**Offres de thèse et de stages post doctoraux:**

\* A Ph.D. (4 years) position and post-doc (2 years) position are available starting June 1st 2017, in the theoretical chemistry group of Leiden University (NL). The research of the student will focus on establishing the applicability of the Ab Initio Molecular Dynamics (AIMD) method to the reaction of polyatomic molecules with metal surfaces, and on developing SRP density functionals for systems in which polyatomic molecules react with metal surfaces. For a few H<sub>2</sub>-metal and CH<sub>4</sub>-metal surface systems, accurate reaction barrier heights are now available from comparisons of experiments with dynamics calculations using either potential surfaces based on DFT using semi-empirical density functionals, obtained with the specific reaction parameter (SRP) approach to DFT, or AIMD with SRP functionals. The major aim of the project is to demonstrate that with the SRP approach to DFT built into AIMD a density functional can be derived that yields a chemically accurate description of

polyatomic molecules other than methane interacting with low index and stepped metal surfaces. The research of the post-doc will focus on applying the Quantum-Monte Carlo electronic structure method to molecules reacting with transition metal surfaces. First results for  $H_2 + Cu(111)$  are encouraging, with the Diffusion Monte-Carlo barrier height differing from the semi-empirical SRP-DFT reference value by just 1.6 kcal/mol. We'll be applying the QMC method to a few other systems, and will try to improve the accuracy of our implementation. The project is funded by NWO, under an NWO TOP grant for Geert-Jan Kroes. The Ph.D. student and the post-doc will be employed by Leiden University.

#### Requirements:

Applicants for the Ph.D. position should have a MSc degree or equivalent degree in Chemistry, Physics, or Applied Mathematics. Experience with computational research and/or computer programming will be counted as advantages. The position is open to all nationalities. Applicants for the post-doc position should have experience with either electronic structure calculations on molecules interacting with metal surfaces, or with dynamics calculations on such systems. The candidate should have a Ph.D. in Chemistry, Physics, or Applied Mathematics. Experience with computer programming and with running calculations on parallel computers will be counted as advantages. The position is open to all nationalities.

#### Appointment:

In both cases the appointment will be for an initial period of 1 year with extension possible to 4 years for the Ph.D. student, this being the standard time allotted to Ph.D. research in The Netherlands, and to 2 years for the post-doc. The envisaged starting date is anywhere between 1 June 2017 and 1 October 2018.

#### Applications:

To be considered for the project, applicants should send an application letter and CV, and should arrange themselves that two (three for the post-doc position) letters of recommendation are sent to Prof. Dr. Geert-Jan Kroes, by email ([g.j.kroes@chem.leidenuniv.nl](mailto:g.j.kroes@chem.leidenuniv.nl)) (it is not enough to provide the names of referees, the applicants should arrange and ensure themselves that letters of reference are sent). Selection of candidates will start on May 31, 2017 and will

continue until the position is filled.

\* **Keywords:** quantum physics, time, measurement theory, mathematical physics

**Employer:** University of Massachusetts, Boston

Applications from highly motivated researchers are welcome for a postdoctoral position in the group of Prof. Adolfo del Campo in the Department of Physics, University of Massachusetts Boston. Candidates must hold a Ph.D. in physics or a related field and ideally have strong background in theoretical quantum physics. Possible research topics include fundamental aspects of time in quantum mechanics, quantum measurement theory, quantum speed limits, non-equilibrium dynamics of isolated and open many-body systems, quantum metrology, and experiment design in quantum technologies. Applications should be sent electronically to [adolfo.delcampo {at} gmail.com](mailto:adolfo.delcampo@gmail.com) including a CV, list of publications and contact details of two academic referees. Please include "QSL2017" in the subject line. The position is funded by the John Templeton Foundation and is available for one year, with a possible extension to a second year. Informal enquiries may be addressed to Adolfo del Campo [[adolfo.delcampo {at} gmail.com](mailto:adolfo.delcampo@gmail.com)].

\* **Optimal control of engineered open quantum systems**

**Qualifications** PhD in theoretical quantum physics.

**Host Laboratory** UTINAM/ICB

**URL Host Laboratory** <https://www.utinam.cnrs.fr/?lang=en> and <http://icb.u-bourgogne.fr/en/>

**Start date** : 1st September 2017

The project, funded by the French "Investments for the Future" programme, is dedicated to deepening our understanding of the interplay between two different techniques of quantum control based, respectively, on reservoir engineering and on the action of optimized external fields [1]. Non-Markovian effects are expected to be relevant in this context [2]. The candidate will be located in Besançon and will spend several short/long periods in Dijon. A PhD in

theoretical quantum physics is required, and knowledge of the theory of open quantum systems would be helpful.

[1] S. J. Glaser et al., Eur. Phys. J. D. 69, 279 (2015).

[2] B. Bellomo, R. Lo Franco and G. Compagno, Phys. Rev. Lett. 15, 160502 (2008).

<http://brightrecruits.com/job/9770/postdoc-optimal-control-of-engineered-open-quantum-systems>

*Le comité de rédaction du bulletin du GDR Thèmes recevra avec plaisir tous vos commentaires et suggestions pour améliorer notre bulletin:*

*Osman Atabek, Arnaud Leclerc, Sabine Morisset, Nadine Halberstadt, Thierry Stoecklin et Dominique Sugny*