

# GDR 3533 'Edifices Moléculaires Isolés et Environnés'

## *Bilan des actions menées en 2017, programme pour 2018 et évolutions thématiques*

### **1. Bilan des actions menées en 2017**

#### *1.1 Ecole thématique 'Modélisation en physico-chimie : de la phase gaz vers la phase environnée'*

Le GDR EMIE alterne traditionnellement réunion plénière et rencontre plus spécialisée, et dans le cadre d'un mandat de 5 ans nous avons naturellement choisi de commencer par une plénière (voir document fourni l'an dernier). Cette année avait lieu une école centrée sur la modélisation moléculaire, essayant de couvrir aussi largement que possible la diversité du spectre de la communauté. Nous avons soumis cette proposition de rencontre à la formation permanente du CNRS qui nous a octroyé 8 k€ de soutien financier, permettant de pratiquer des frais d'inscriptions modérés pour les non-permanents (400 €) et restant très raisonnables (600 €) pour les chercheurs hors CNRS compte-tenu du niveau et du caractère unique d'une telle formation jamais rencontrée dans les communautés de physico-chimie et chimie théorique, y compris hors de France. L'école thématique s'est tenue au Centre Blaise Pascal à l'ENS Lyon du 9 au 13 octobre 2017, bénéficiant à cet égard du soutien logistique du CBP et du CROUS. Elle était organisée par F. Calvo, T. Pino et F. Chirot.

Nous sommes parvenus à fournir à une trentaine de stagiaires (plus les intervenants) une formation complète sur la base de cours magistraux, séminaires de spécialité et demi-journées de travaux pratiques numériques dont le programme est détaillé ci-après, soulignant par une astérisque les intervenants non membres du GDR :

#### **9/10/2017**

- Structure électronique : DFT et méthodes basées sur la fonction d'onde (R. Vuilleumier\*, ENS Paris)
- Structure électronique : états excités (E. Fromager\*, Univ. Strasbourg)
- TP 1 : chimie quantique (F. Rabilloud, Université Lyon 1)

#### **10/10/2017**

- Méthodes empiriques, semi-empiriques et hybrides (G. Monard\*, Université de Lorraine)
- Echantillonnage et optimisation structurale (P. Parneix, Université Paris-Sud)
- TP 2 : méthodes hybrides (M. Rapacioli, LCPQ Toulouse)
- Séminaire : incertitudes des résultats de modèles (P. Pernot\*, LCP Orsay)

#### **11/10/2017**

- Dynamique classique et ab initio (M.-P. Gaigeot, Université d'Evry)
- Traitement quantique des noyaux (N. Halberstadt, LCPQ Toulouse)
- TP 3 : Dynamique Moléculaire (S. Picaud, UTINAM Besançon)
- Séminaire : analyse de la liaison chimique (V. Tognetti\*, Université de Rouen)

#### **12/10/2017**

- Environnements solides, surfaces et matrices (B. Gervais, CEA Caen)
- Approche statistique de la réactivité chimique (P. Larregaray\*, ISM Bordeaux)
- TP 4 : Monte Carlo (S. Picaud, UTINAM Besançon)

#### **13/10/2017**

- Dynamique quantique et non-adiabatique (B. Lasorne\*, Institut Charles Gherardt Montpellier)
- Environnements fluides (B. Rousseau\*, LCP Orsay)

Le matériel pédagogique est disponible sur le site du GDR (<https://www-liphy.ujf-grenoble.fr/emie/intro.htm>). Le retour sur cette formation est très positif, la plupart des participants émettant le souhait d'une réédition future (celle ci n'est toutefois pas envisagée dans le cadre du mandat actuel).

#### *1.2 Soutien aux collaborations*

La ventilation d'une partie importante du budget pour financer des collaborations bi- ou multilatérales privilégiant les chercheurs non-permanents reste un élément structurant essentiel de notre GDR. En 2017,

nous avons comme chaque année choisi de financer l'ensemble des propositions reçues, réduisant les montants sollicités après arbitrage en bureau.

La liste des projets soutenus, leurs acteurs et les montants octroyés se déclinent comme suit :

- Changement de structure et photofragmentation d'un modèle de la triple hélice du collagène en phase gazeuse*, impliquant le CIMAP (J.-C. Pouilly) et l'ILM (équipe SpectroBio) : **500 €** attribués pour financement du déplacement d'un doctorant ;
- Etudes théoriques et expérimentales d'hydrocarbures aromatiques polycycliques adsorbés sur la glace*, impliquant PhLAM (C. Toubin) et le LCPQ (équipe MAD) : **700 €** attribués pour financement du déplacement d'un doctorant ;
- Réactivité PAH-H<sub>2</sub>O, dynamique de relaxation de complexes pyrène-eau*, impliquant ISM (J. Mascetti) et CELIA (V. Blanchet) et PhLAM (J. Noble), **400 €** attribués pour financement du déplacement de J. Noble ;
- DIAM/expérience et modélisation*, impliquant l'IPNL (équipe de M. Farizon) et le LiPhy (F. Calvo), **300 €** attribués pour financement de déplacements de F. Calvo ;
- Projet GOUTTE-He-Alcynes*, impliquant l'IPR (A. Viel et J.-M. Launay) et le LIDYL (J.-M. Mestdagh), **500 €** attribués pour financement de séjours entre Rennes et Saclay ;
- Détermination des sites de protonation de molécules acide/base par spectroscopie UV d'ions refroidis en trappe*, impliquant PIIM (C. Jouvét) et CLUPS-ISMO (équipe de G. Grégoire), **500 €** attribués pour financement de séjours à Marseille ;
- Effets de température sur la spectroscopie vibrationnelle par dynamique moléculaire dirigée*, impliquant l'ISMO (P. Parneix) et le LiPhy (F. Calvo), **500 €** attribués pour financement de séjours à Orsay de F. Calvo ;
- Caractérisation in situ, de grains carbonés dans l'infrarouge (1.5 microns) par CRDS*, impliquant l'IPR (R. Georges) et le LiPhy (S. Kassi), **700 €** attribués pour financement d'une mission à l'IPR ;
- Theoretical treatment of CnN+-He collisions at high velocity, A joined experimental/theoretical study*, impliquant l'ISMO (K. Beroff), l'IPNO (M. Chabot), le CELIA (B. Pons), le LCPMR (A. Dubois), **700 €** attribués pour financement d'un déplacement de doctorant ;
- Mécanismes de photodissociation des complexes [peptide,Ag]<sup>+</sup>*, impliquant l'ILM (L. MacAleese) et l'ISMO (S. Soorkia), **500 €** attribués pour financement de déplacements de part et d'autre ;
- Energie de fragmentation des dimères et trimères d'hydrocarbures aromatiques polycycliques*, impliquant l'ILM (S. Martin) et l'IRAP (C. Joblin), **500 €** attribués pour financement de missions de part et d'autre.

### 1.3 Atelier thématique 'Compétition entre modes de relaxation'

Outre les collaborations, nous avons proposé lors de l'appel annuel à la communauté de financer un atelier sur un format réduit (deux demi-journées) sur un thème plus spécifique, et ainsi pu tenir sur Orsay (IAS) une réunion les 6 et 7 novembre 2017 sur le thème de la 'Compétition entre voies de relaxation'. Cette thématique relativement centrale dans le GDR a su mettre en présence des chercheurs travaillant sur des systèmes variés (biomolécules et molécules d'intérêt astrophysique/atmosphérique) par excitation laser ou collisionnelle et des diagnostics également divers (spectroscopie, spectrométrie de masse, pièges et anneaux de stockage). La réunion organisée par C. Falvo et T. Pino (ISMO) a eu un franc succès et rassemblé une quarantaine de participants dont une dizaine de provinciaux. Le programme succinct est donné ci-après.

#### 6/11/2017

13h15 Serge Martin, ILM, Lyon, *Relaxation du naphthalène et du dimère de naphthalène*

13h50 Satchin Soorkia, ISMO, Orsay, *Dynamique de relaxation des états excités de molécules protonées*

14h25 Jean-Philippe Champeaux, LCAR, Toulouse, *Dissociation « statistique » de molécules isolées par collision avec des ions du keV*

15h40 Pascal Parneix, ISMO, Orsay, *Analyse de la formation de défauts dans des PAHs à partir de profils d'énergie libre*

16h15 Aude Simon, LCPQ, Toulouse, *Dissociation/isomérisation de cations PAH par dynamique moléculaire/DFTB*

16h50 Riccardo Spezia, LAMBE, Evry, *Moving away from minimum energy path in gas phase reactions*

17h25 Marie-Anne Hervé du Penhoat, IMPMC, Paris, *Fragmentation du deoxyribose par ionisation de coeur*

#### 7/11/2017

9h00 Patrick Rousseau, CIMAP, Caen, *Réactivité au sein d'agrégats de molécules carbonées induite par la collision avec un ion*

9h35 Débora Scuderia, LCP, Orsay, *Contrôle cinétique vs contrôle thermodynamique dans les processus de fragmentation de la L-cystéine-S-sulfate : spectrométrie de masse tandem, spectroscopie IRMPD et dynamique moléculaire*

10h10 Luke MacAleese, ILM, Lyon, *Spectroscopie d'action : quel type de fragmentation observe-t-on ?*

11h25 Raluca Cireasa, ISMO, Orsay, *Processes of photo-damage and photo-protection in 5-halouracils investigated by*

## **2. Bilan budgétaire**

Le budget 2017 (15 k€) a été réparti comme d'accoutumée de façon équilibrée entre les deux principales actions de soutien aux collaborations (6 k€) et de réunion, cette année thématique (6 k€). L'atelier thématique, qui répondait aux sollicitations annuelles plus vastes sur l'appel aux collaborations, a reçu une promesse de soutien de 2 k€ mais qui n'a finalement pas été nécessaire en raison de soutiens locaux suffisants grâce à l'effet de levier du GdR (Labex PALM en particulier). Le kilo euro restant sert à financer les membres provinciaux du bureau du GDR à l'occasion de sa réunion au printemps pour arbitrer les demandes de financement et discuter des actions. Cette réunion a eu lieu au siège du CNRS.

L'école thématique elle-même a vu son budget équilibré grâce aux frais d'inscriptions, aux subventions de la formation permanente du CNRS, des GDR EMIE et RFCT (un soutien du GDR THEMS n'a pas été honoré à temps), mais également de l'Université Lyon 1 et du Labex PALM, ce dernier finançant les contributions des intervenants du plateau de Saclay.

L'équilibre budgétaire étant respecté pour les autres événements, et l'atelier arrivant en fin d'année (début novembre), l'excédent budgétaire a été utilisé pour des dépenses d'équipement qui seront compensées sur des contrats en 2018. Cela permettra de renouveler l'action « atelier thématique » en 2018.

Le budget du GDR EMIE est géré au LiPhy, avec l'aide précieuse de Nadine d'Andrea qui s'est notamment acquittée en 2017 de la gestion budget & missions de l'école thématique.

## **3. Visibilité du GDR EMIE**

Le principal mode de communication du GDR reste la diffusion d'informations sur la liste de chercheurs émergeant à sa liste constituée à l'occasion du renouvellement. Une demi-douzaine de courriels sont envoyés chaque mois, majoritairement en vue d'annonces de financements de post-docs ou thèses, de manifestations pouvant intéresser la communauté et, en fonction du calendrier, des informations relatives aux activités du GDR et de ses actions ou appels à projets.

Le site du GDR ([www.liphy.fr/emie.htm](http://www.liphy.fr/emie.htm)), qui évolue au gré des événements organisés par le réseau, pourrait sans doute être mis à jour plus souvent et reprendre les annonces soumises pour diffusion par courriel, mais ces annonces requièrent généralement une attention immédiate et risquent une obsolescence à court terme. Nous avons également un projet d'enrichissement notable permettant aux visiteurs de connaître les équipes possédant les compétences souhaitées, mais une telle fonctionnalité nécessite un soutien web non encore pleinement disponible, ainsi qu'une consultation plus formelle de la communauté.

## **4. Programme pour 2018**

La réunion prévue pour 2018 sera plénière et se tiendra au domaine de Chalès en Sologne courant novembre 2018. Elle sera organisée par G. Grégoire (ISMO) et C. Clavaguéra (LCP). Le programme, en cours de réflexion au moment où ces lignes sont écrites, mettra bien sûr en avant les thématiques nous semblant le plus d'actualité et couvrant l'ensemble des axes du projet.

L'appel à soutien financier sera lancé en 2018 sur la base des crédits alloués. Nous proposerons à cette occasion un soutien pour une nouvelle journée thématique, l'expérience de 2017 nous ayant semblé tout à fait profitable. A l'occasion de ce contact, nous solliciterons par ailleurs la communauté pour mettre à jour la liste des participants et émergents à la liste de diffusion et essaierons de recueillir une liste de mots-clés caractérisant leur activité devant permettre à terme d'identifier qui fait quoi parmi nous et, surtout, faciliter les collaborations sur la base d'expertise scientifique parmi des gens ne se connaissant pas encore forcément.

## 5. Evolutions thématiques et prospective

Les actions menées en 2017 ont permis de confirmer le rôle structurant du GDR mais de façon inégalitaire entre laboratoires ou équipes fortement impliquées (Orsay, Lyon, Toulouse, Bordeaux, Lille et Rennes notamment) et autres équipes ayant rejoint le GDR à l'occasion du renouvellement mais ne sollicitant pas les outils, en particulier financiers, mis à disposition par le réseau. L'un des objectifs sera donc à l'occasion de la réunion plénière de renforcer les liens vers les communautés des sciences de l'Univers, notamment pour les sciences de l'atmosphère et la planétologie. Les développements théoriques vers le traitement de l'environnement restent également à poursuivre en lien avec un meilleur transfert de connaissance entre les spécialistes de phase gazeuse que nous sommes historiquement et ces communautés aux interfaces. Des développements vers la physico-chimie des aérosols pourraient à cet égard servir de pont vers des équipes, ce qui ouvrirait de nouveaux champs de recherche avec la réactivité au sein de systèmes moléculaires complexes, échanges trop limités malgré des discussions régulières. Une façon de diriger le GDR vers ces disciplines encore non suffisamment représentées pourrait être l'organisation d'ateliers courts, suivant le format déjà suivi en novembre 2017 à Orsay (voir plus haut) en privilégiant ces thématiques et en encourageant les porteurs à identifier les participants actuellement non membres du réseau. Cet atelier pourrait être organisé conjointement avec un autre réseau (PN LEFFE/INSU, GDR SUIE, Labex CAPPA, etc).