

# GDR 3533 'Edifices Moléculaires Isolés et Environnés'

## *Bilan des actions menées en 2018, programme pour 2019 et évolutions thématiques*

### 1. Bilan des actions menées en 2018

#### 1.1 Réunion plénière

La deuxième réunion plénière du GDR EMIE s'est tenue du 12 au 15 novembre 2018 au Domaine de Chalès (Nouan-le-Fuzelier, Sologne) et a rassemblé environ 70 participants. La manifestation a été principalement organisée par G. Grégoire (ISMO) et C. Clavaguéra (LCP). 4 conférences plénières d'ouverture ont introduit des sessions, et une quinzaine de contributions orales ont été sélectionnées parmi les propositions reçues, favorisant celles issues de collaborations financées par le réseau, veillant naturellement à respecter les équilibres thématiques, géographiques, et la parité H/F. Les quatre conférences d'ouverture ont été choisies en vue de nourrir les discussions sur les thématiques du futur projet de GDR, et certains de ces intervenants ont d'ailleurs été sollicités pour rejoindre le bureau à partir de 2019 et préparer le futur projet :

Mardi 13/11 à 9h, **Mario Barbatti** (ICR, Marseille) *Simulations of Electronic Activated Organic Systems: Advances, Appraisal, Applications*

Mardi 13/11 à 14h, **Olivier Sublemontier** (NIMBE, Saclay) *Sonder la structure et réactivité de nanoobjets en phase gazeuse*

Mercredi 14/11 à 9h, **Sophie Sobanska** (ISM, Bordeaux) *Microchimie hétérogène de particules atmosphériques*

Jeudi 15/11 à 9h, **Guillaume van der Rest** (LCP, Orsay) *Spectrométrie de masse couplée à la mobilité ionique pour des applications biostructurales : cas de la protéine prion et des oxydations de protéines*

Outre les présentations plénières et les contributions orales, deux séances posters sont venues compléter le programme ainsi qu'une table ronde permettant de soulever quelques points scientifiques discutés en assemblée complète. Un bilan des actions et les actions prévues pour 2019 ont également été présentées.

Le programme complet est disponible sur le site du GDR,

<https://www-liphy.ujf-grenoble.fr/emie/pleniere18.htm>.

#### 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 2018, 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 :

–*Etudes théoriques et expérimentales sur la réactivité d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAH) avec l'eau et le fer*, impliquant le PhLAM, l'ISM et le LCPQ : **300 €** pour le PhLAM, **200 €** pour l'ISM ;

–*Croissance de molécules lors de collisions ion-agrégat d'hydrocarbures*, impliquant le CIMAP et le LCPQ : **600 €** accordés au LCPQ ; financement de missions d'une doctorante ;

–*Effets d'environnement sur la spectroscopie IR de C<sub>60</sub> et rôle des hautes pressions*, impliquant l'ISMO et le LiPhy : **400 €** accordés au LiPhy ;

–*Stabilité d'agrégats de triples hélices du collagène en phase gazeuse*, impliquant le CIMAP et l'ILM : **500 €** accordés au CIMAP ; financement de missions d'une doctorante ;

–*Interaction des vents stellaires avec les molécules prébiotiques*, impliquant le CIMAP et le LCAR : **700 €** accordés au CIMAP ; financement de missions pour une doctorante ;

–*Réactivité PAH-H<sub>2</sub>O. Dynamique de relaxation de complexes PAH-eau*, impliquant le PhLAM, le CELIA, l'ISM et le LCPQ : **350 €** accordés au PhLAM et **250 €** accordés au LCPQ, financement d'une jeune chercheuse ;

–*Fragmentation d'agrégats de pyrène*, impliquant l'ILM, le LCPQ et l'IRAP : **500 €** accordés à l'ILM ;

–*Structure électronique de radicaux : évaluation et apport de la DFTB+CI*, impliquant le LCPQ et le LCM ; **350 €**

accordés au LCM ;

–*Projet Goutte-He-Alcynes*, impliquant le LiDYL et l'IPR : 600 € accordés à l'IPR pour financer une mission d'un stagiaire participant.

### 1.3 Atelier thématique 'Réactivité chimique en phase hétérogène' (conjoint avec le GDR Suie)

En sus des soutiens aux collaborations, nous avons en 2018 renouvelé l'appel à propositions pour des ateliers spécialisés de format court (2 jours maximum), sans frais d'inscription, et avons ainsi pu soutenir une manifestation commune avec le GDR Suie piloté par l'INSU et portant sur la réactivité chimique en phase hétérogène. Céline Toubin, Cristian Focsa et Denis Duflot (PhLAM), Aude Simon (LCPQ), Emilie Perraudin (EPOC), Pascale Desgroux et Xavier Mercier (PC2A) en ont été les organisateurs, pour une tenue au PhLAM à Lille le 31 mai et 1<sup>er</sup> juin. L'objet de cet atelier visait à réunir les communautés des 2 GDR et en particulier ceux plus particulièrement concernés par les phénomènes physico-chimiques impliquant aussi bien les phases condensée que gazeuse. L'atelier a réuni environ 45 participants et le fort intérêt incite à renouveler l'action. Le programme de ces deux demi-journées est donné ci-après.

#### 31/05/2018

9h30 Jean-François Doussin (LISA), *Processus de transformations intra-particulaires affectant la composition et les propriétés de l'aérosol atmosphérique*

10h00 Alexandre Thomas (IMT), *Processus chimiques et nucléation dans l'ozonolyse du limonène*

10h30 Mathieu Riva (IRCELYON), *Formation, impact and fate of highly oxidized molecules (HOM)*

11h30 Marie-Pierre Gaigeot (LAMBE), *Mineral/water interfaces characterized by Ab Initio Molecular Dynamics: making the link between structure and SFG vibrational spectroscopy*

12h00 Emilie Perraudin (EPOC), *Formation et vieillissement des aérosols organiques secondaires (AOS) : rôle des réactions atmosphériques à l'interface gaz-particule ?*

12h30 Denis Duflot (PhLAM), *Approche théorique de la réactivité des aérosols*

14h30 Thierry Chiavassa (PIIM), *Réactivité dans les analogues de glaces interstellaires : Caractérisation de radicaux et formation de molécules organiques complexes*

15h00 Eric Michoulier (LCAR), *Application d'une approche multi-méthodes - dynamique moléculaire/champ de force et SCC-DFTB- pour l'étude de systèmes d'intérêt astrophysique et atmosphérique*

15h30 Sébastien Zamith (LCAR), *Fragmentation d'agrégats de pyrène induite par collisions*

16h00 François Dulieu (LERMA), *Réactivité d'un film de coronène avec H et O à basse température*

#### 1/06/2018

9h00 Ismael Ortega (ONERA), *Unveiling the molecular mechanism behind atmospheric nucleation*

9h30 Xavier Mercier (PC2A), *Nucléation des particules de suies dans les flammes*

10h30 Ludovic Martin-Gondre (UTINAM), *Simulation de la réactivité d'espèces chlorées sur des HAP avec défaut*

11h00 Claire Pirim (PhLAM), *Étude micro-Raman de la formation et morphologie de cristaux de glace sur des particules de suies et substrats de référence*

11h30 Jérôme Cuny (LCPQ), *Développements et applications de l'approche SCC-DFTB pour la chimie atmosphérique*

L'atelier s'est conclu l'après-midi du 1<sup>er</sup> juin par des visites d'expériences aux laboratoires PhLAM et PC2A.

## 2. Bilan budgétaire

Le budget 2018 (15 k€) a été ventilé comme d'accoutumée de façon équilibrée entre les deux principales actions de soutien aux collaborations (6 k€) et de la réunion plénière (6 k€). L'atelier thématique, qui répondait aux sollicitations annuelles plus vastes sur l'appel aux collaborations, a reçu un soutien de 1.5 k€. Le montant restant a servi à financer les missions des 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 le 14 mars.

La réunion plénière a eu un budget équilibré grâce aux frais d'inscriptions et aux soutiens financiers extérieurs et généreux du Labex PALM (Orsay), de l'Université Paris-Saclay et de la Fédération de Chimie Physique Paris Sud.

Le GDR a par ailleurs décidé exceptionnellement de soutenir financièrement des manifestations extérieures, en l'occurrence l'inscription de deux étudiants à la réunion du Réseau Français de Chimie Théorique qui possède une structure de GDR géré par l'INC et avait soutenu notre propre réseau en 2017 pour l'école thématique tenue à Lyon.

Le budget du GDR EMIE est toujours géré au LiPhy, avec l'aide précieuse de Nadine d'Andrea, administratrice.

### 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 et mise à jour de façon occasionnelle. Jusqu'à 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.

Un stagiaire de DUT a été recruté pour un stage visant à étoffer le site web du GDR et présenter la liste des équipes participantes de façon dynamique, en énumérant des compétences ou expertises parmi une liste établie en bureau et couvrant préférentiellement les méthodes d'analyse expérimentales ou théoriques (spectroscopies, spectrométrie, sources, dynamique classique ou quantique, etc). Le visiteur a désormais la possibilité d'identifier qui, au sein du GDR, possède une compétence particulière et, inversement, quelles compétences sont détenues par une équipe de la liste. Voir [https://www-liphy.ujf-grenoble.fr/emie/liste\\_labophp](https://www-liphy.ujf-grenoble.fr/emie/liste_labophp)

### 4. Actions prévues pour 2019

La principale manifestation prévue en 2019 sera thématique et consistera en une session d'une semaine aux Houches, fin août 2019, en collaboration avec le GDR UP et portant sur la 'dynamique multi-échelle dans les systèmes moléculaires'. Elle sera principalement organisée par Lionel Poisson (LIDYL), Pascale Changenet-Barret (LOB) et Federica Agostini (LCP), et consistera en des interventions plénières de 1h30 chacune, à vocation pédagogique, couvrant les aspects expérimentaux et théoriques des phénomènes dynamiques prenant place dans les systèmes moléculaires plutôt isolés, depuis les temps courts jusqu'aux temps macroscopiques. Les sessions prévues et les intervenants ayant accepté de contribuer sont :

- Fernando Martin (UAD, Madrid) : *Introduction générale*
- Pascal Parneix (ISMO), *Processus statistiques aux temps longs*
- Patrick Rousseau (CiMAP), *Mesures expérimentales de relaxation aux temps longs*
- Sophie Carles (IPR), *Cinétique d'évaporation et nucléation*
- Federica Agostini (LCP) : *Intersections coniques et dynamique non-adiabatique, traitement semi-classique*
- Johanna Brazard (IPCMS) : *Cohérence électronique expérimentale*
- Benjamin Lasorne (ICMG) : *Intersections coniques et dynamique non-adiabatique, traitement quantique*
- Françoise Remacle (Université de Liège) : *Contrôle cohérent*
- Damien Laage (ENS Paris) : *Relaxation et transferts vibrationnels, processus cohérents*
- Manuel Joffre (LOB) : *Cohérence vibrationnelle expérimentale*
- Aurélien de la Lande (LCP) : *Théorie des processus de transfert électroniques*
- Sachin Soorkin (ISMO) : *Transfert d'électron : aspects expérimentaux*
- Yann Mairesse (CELIA) : *Processus attosecondes ; aspects expérimentaux*

Pour cette session, à mi-chemin entre école et atelier, nous pratiquerons des tarifs attractifs vis-à-vis des jeunes chercheurs et essaierons de proposer des séances pratiques de travaux numériques ainsi que des démonstrations expérimentales.

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 réussie des deux années précédentes nous encourageant dans ce sens.

Des contacts avec des communautés existantes ont par ailleurs permis d'identifier des demandes à effectuer d'autres actions communes avec notre GDR. Le programme PCMI de l'INSU, dans lequel plusieurs équipes de EMIE sont déjà impliquées, nous a par exemple sollicités pour tenir un atelier conjoint sur la thématique des glaces astrophysiques. Cette thématique recouvre en partie celle de l'atelier de 2018 mais aurait une orientation davantage tournée vers l'astrochimie, plutôt que les sciences atmosphériques, et les basses températures. Nous devrions solliciter au sein du réseau une ou deux personnes pour organiser cet atelier que le GDR EMIE co-financerait.

## **5. Evolutions thématiques et prospective**

Outre la sollicitation de PCMI devant se concrétiser par un atelier à l'automne 2019, des contacts pris avec des membres du GDR ThEMS nous laissent envisager un atelier commun courant 2020. Une telle action sera discutée lors du bureau de printemps.

Le GDR EMIE est parvenu à mi-mandat et nous réfléchissons activement à son futur, qui nécessairement devra passer par un fort renouvellement de ses thématiques à échéance de 2020. Nous procédons en 2019 à un renouvellement partiel du bureau de EMIE, avec le départ de certains de ses membres (M. Chabot, G. Grégoire) et l'arrivée de chercheurs notamment invités lors de la réunion plénière (O. Sublemontier, S. Sobanska, ainsi que P. Carçabal de l'ISMO). Un tel renouvellement sera amplifié courant 2019 et 2020 dans l'objectif de bâtir le prochain projet.

Afin de nourrir la réflexion, un questionnaire a été proposé à l'ensemble de la communauté pour identifier ses attentes, ses points de satisfaction ou de questionnement. L'analyse des résultats de ce questionnaire s'effectuera lors de la réunion du bureau au printemps 2019, qui arbitre les demandes de financement. Le questionnaire établi sur la base de google forms est consultable à l'adresse <https://goo.gl/forms/jH4Cj7OiwiHAhICy2>

La dynamique actuelle du GDR, avec un succès maintenu sur l'appel aux collaborations et la tenue de 2 manifestations scientifiques en propre ou en coopération avec d'autres communautés nous confortent sur le rôle important joué par le réseau à l'échelle nationale.