

GDR 3533 'Edifices Moléculaires Isolés et Environnés'

Bilan des actions menées en 2019, programme pour 2020 et évolutions thématiques

1. Bilan des actions menées en 2019

1.1 Atelier thématique & action de formation : atelier aux Houches sur la dynamique multi-échelles

L'action principale du GDR en 2019 a été l'organisation conjointe d'un atelier de formation sur la « dynamique multiéchelles dans les systèmes moléculaires ». Cet atelier s'est tenu aux Houches du 26 au 30 août 2019, et a été organisé conjointement avec le GDR UP, principalement par Lionel Poisson (LIDYL), Pascale Changenet (LOB), Federica Agostini (LCP) ainsi que Franck Lépine pour le GDR UP et Florent Calvo pour le GDR EMIE. L'atelier a volontairement mis l'accent sur des interventions généralistes couvrant l'ensemble des problématiques expérimentales et théoriques sur les phénomènes dynamiques et cinétiques concernant principalement les systèmes en phase gazeuse mais sur des échelles de temps allant de l'ultracourt (as) jusque vers les cinétiques macroscopiquement longues. L'atelier s'est déroulé sur 4 demi-journées de cours magistraux et une demi-journée de travaux pratiques, les participants étant invités à choisir des TP théoriques (modélisation de la dynamique des états excités dans le thiophène) ou expérimentaux (interprétation de mesures expérimentales de signaux d'imagerie de vitesse ou de génération de profil spectraux), préparés respectivement par F. Agostini et Vincent Lorient (ILM).

Les cours principaux, de 1h30 chacun, ont été donnés par

Fernando Martin (UAD, Madrid) *Real-time observation of electron and nuclear dynamics in molecules: from the attosecond to the picosecond*

Pascal Parneix (ISMO, Orsay) *Intramolecular dynamics from statistical theories*

Patrick Rousseau (CiMAP, Caen) *Experimental studies of decays at long timescales*

Sophie Carles (IPR, Rennes) *Kinetic studies of ion-molecule reaction in gas phase: models and experiments*

Federica Agostini (LCP, Orsay) *Trajectory-based approaches to excited-state dynamics*

Benjamin Lasorne (ICGM, Montpellier) *Nonadiabatic dynamics - current methods and challenges*

Alexander Kuleff (IPC, Heidelberg) *Correlation driven attosecond hole migration in molecules*

Manuel Joffre (LOB, Palaiseau) *Multi-dimensional infrared spectroscopy : experimental methods and applications*

Cyril Falvo (ISMO, Orsay) *Modeling coherent multidimensional vibrational spectroscopy*

Aurélien de la Lande (LCP, Orsay) *Physical models to rationalize charge transfers between electron donors-acceptors, from attosecond to microsecond time scales*

Satchin Soorkia (ISMO, Orsay) *Electron and proton transfers*

Yann Mairesse (CELIA, Bordeaux) *Measuring attosecond dynamics in molecules*

Françoise Remacle (TPC, Liège) *Photoinduced electronic and nuclear dynamics in molecules*

L'atelier a été suivi par une trentaine de participants dont une bonne proportion (1/3) d'étudiants en thèse et les retours ont été très positifs, suggérant de tenir d'autres éditions similaires à échelle de 2-3 ans. Outre les présentations magistrales et les TP, il a été proposé aux participants de présenter leurs propres travaux sous forme de posters, deux séances après-dîner étant consacrées à la quinzaine de posters présents.

Plus d'informations sont disponibles sur le site de cette rencontre,

http://iramis.cea.fr/meetings/Ecole_EMIE_UP/index.php#header

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 2019, 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 :

- Effets de température sur la spectroscopie vibrationnelle par dynamique moléculaire dirigée*, impliquant l'ISMO et le LiPhy : **400 €** accordés au LiPhy ;
- Observation des ions négatifs de la chlorophylline du cuivre*, impliquant le PIIM, l'ISMO et le LIDYL : **600 €** accordés au PIIM pour financer notamment le séjour d'un doctorant ;
- Méthodes multiréférence et états excités de modèles de protéine : une nouvelle méthode de sélection de l'espace actif*, impliquant le LIDYL et le LCPQ : **350 €** accordés au LIDYL ;
- Etude de l'évolution de la transition de résonance de charge des dimères de PAH en fonction de la température interne*, impliquant l'ILM, le LCPQ, le LCAR et l'IRAP : **400 €** accordés à l'ILM ;
- Etudes théoriques et expérimentales sur la réactivité d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (PAH) avec l'eau et le fer*, impliquant l'ISM, le LCPQ, le PIIM et l'Université de Bâle : **400 €** accordés au LCPQ notamment pour financer les déplacements d'un post-doc ;
- Réactivité PAH-H₂O, dynamique de relaxation de complexes PAH-eau*, impliquant le PIIM, le CELIA, l'ISM, et le LCPQ : **350 €** accordés à l'ISM ;
- Couches interfaciales d'eau BIL et DL appliquées à l'interface argile/eau liquide et à la caractérisation de la réactivité et adsorption à l'interface aqueuse*, impliquant le LCPQ et LAMBE : **450 €** accordés au LCPQ ;
- Liaison hydrogène à 0,4 K*, impliquant l'IPR et le LIDYL : **500 €** accordés au LIDYL pour financer le voyage d'une doctorante ;
- Structure électronique de radicaux : évaluation et apport de la DFTB-CI*, impliquant le LCPQ et le LCM : **350 €** accordés au LCM ;
- Exploration of the photo-isomerization mechanisms in DASA photoswitches*, impliquant l'université de Mons, l'ISA et l'ILM ; **550 €** accordés à l'ILM pour financer le déplacement d'un doctorant ;
- Etude anharmonique des vibrations de hydrocarbures aromatiques polycycliques à la surface de la glace dans le milieu interstellaire*, impliquant l'ILM et PhLAM; **400 €** accordés au PhLAM ;
- Développement d'outils de simulation moléculaire de spectres de dichroïsme circulaire vibrationnel*, impliquant le LCP et le LiPhy ; **350 €** accordés au LiPhy ;
- Stabilité des agrégats chargés et émission de champs – développement code DFTB-CI*, impliquant le CiMAP et le LCPQ ; **450 €** accordés au CiMAP ;
- Croissance de molécules lors de collisions ion/photon-agrégat d'hydrocarbures*, impliquant le CIMAP et le LCPQ ; **550 €** accordés au CiMAP pour financer le déplacement d'une doctorante

soit un total de 6100 euros ventilés sur 14 projets scientifiques.

1.3 Atelier thématique sur les glaces interstellaires (conjoint avec le programme PCMI de l'INSU)

Sur une proposition du programme PCMI de l'INSU nous avons soutenu l'organisation d'un atelier thématique sur la problématique des glaces interstellaires, leur observation, les expériences en laboratoires, et leurs modélisations. L'atelier a pu être organisé par Géraldine Féraud et Alexis Markovits (LCT Jussieu) pour PCMI, Alicja Domaracka (CIMAP), Céline Toubin (PhLAM), Joëlle Mascetti (ISM) pour EMIE. Le GDR a soutenu cette initiative à hauteur de 2000 euros environ, le reste incombant aux sponsors locaux et à PCMI. L'atelier s'est déroulé au CNES à Paris sur un peu plus de 2 demi-journées, les 4 et 5 octobre 2019 et a réuni les orateurs invités suivants,

M. Bertin (LERMA), **P. Boduch** (CIMAP), **E. Dartois** (ISMO), **F. Dulieu** (LERMA), **F. Duvernay** (PIIM), **J. Noble** (PIIM), **F. Pauzat** (LCT), **A. Simon** (LCPQ), **V. Taquet** (Arcetri Astrophysical Observatory, Firenze), **C. Toubin** (PhLAM), **V. Wakelam** (LAB), **S. Zamith** (LCAR)

ainsi que 6 contributions orales. L'atelier s'est en particulier articulé autour de 3 tables rondes 'de travail', chaque participant étant invité à s'investir dans un thème de son choix et participer aux discussions et réflexions sur le dit thème :

- 1-structure et composition des glaces
- 2-évolution des glaces
- 3-modèles astrochimiques

Pour chaque thème, les organisateurs avaient défini une liste de questions soumises à réflexion des participants préalablement à la tenue de l'atelier, et les discussions proprement dites se sont déroulées en parallèle en 45 minutes. Les réflexions de ces tables rondes ont été discutées collectivement en fin d'atelier.

Ce format original, bien qu'un peu risqué, s'est révélé payant et a permis d'identifier les forces et marges de progression de la communauté française travaillant sur les glaces astrophysiques et a souligné l'apport potentiel de EMIE sur cette thématique, à l'interface de la physico-chimie en phase condensée, en phase isolée, des observations astrophysiques et des expériences de laboratoire. Nous sommes persuadés que des collaborations fructueuses en naîtront dans les prochains mois.

Plus d'informations sur cet atelier sont disponibles sur son site internet, <https://atelier-glaces.sciencesconf.org/>

2. Bilan budgétaire

Le budget 2019 (15 k€) a été ventilé comme d'accoutumée de façon équilibrée entre les deux principales actions de soutien aux collaborations (6 k€) et de l'atelier aux Houches (6 k€). L'atelier thématique, qui répondait aux sollicitations annuelles plus vastes sur l'appel aux collaborations, a reçu un soutien de 1.7 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 28 mars.

Outre la contribution du GDR UP et les frais d'inscription inhérents à l'utilisation du site de l'école de physique des Houches, l'atelier sur la dynamique multiéchelle dans les systèmes moléculaires a bénéficié du soutien financier du Labex PALM, du CECAM-FR-RA et de la Fédération de Chimie Physique Paris Sud. L'atelier sur les glaces astrophysiques a reçu un soutien du programme PCMI et du laboratoire ISM à Bordeaux. Il a également bénéficié de l'usage gracieux de la salle de séminaires du CNES et de fournitures généreusement fournies par le CIMAP.

3. Réflexions sur le futur de EMIE

Suite à la réunion plénière de 2018, nous avons entamé le renouvellement du GDR sous la forme d'un renouvellement partiel du bureau scientifique. Cette réflexion s'est poursuivie en 2019 avec la décision de solliciter un nouveau renouvellement, en continuant d'affirmer EMIE comme un acteur essentiel de la physique moléculaire fondamentale en France, en réitérant son interdisciplinarité en sciences de l'Univers et en Sciences du Vivant, et en proposant deux nouvelles directions également interdisciplinaires :

- physico-chimie des atmosphères : Terre et planètes, mécanismes de formation des aérosols
- liens avec l'énergie : assemblages pertinents pour les énergies fossiles, photoréactivité, capture de gaz en phase microporeuse, etc

Nous avons également réfléchi à de possibles évolutions dans les moyens d'action, mais souhaitons a priori retenir le fonctionnement actuel d'une rencontre plénière tous les 2 ans, en alternance avec une rencontre de formation, et un atelier plus spécialisé, sur un format plus court, chaque année.

A l'automne 2019, la composition de la futur équipe porteuse a été achevée, et le dossier de renouvellement sera préparé pour dépôt prévu fin janvier 2020.

4. Actions prévues pour 2020

La principale manifestation prévue en 2020 sera une rencontre plénière, qui sera l'occasion de faire un bilan du mandat et présentera les grandes lignes du projet de renouvellement. La rencontre se tiendra au centre du CAES du CNRS à l'île d'Oléron, du 25 au 28 mai 2020, et privilégiera aussi les présentations des résultats obtenus au sein des collaborations soutenues financièrement par EMIE. Pour cette rencontre, 4 orateurs pléniers ont accepté d'introduire les sessions thématiques :

- Jean-François Doussin** (LISA)
- Karine Costuas** (ISCR)
- Olivier Berné** (IRAP)
- Valérie Gabelica** (ARNA, INSERM Bordeaux)
- Aleksandar Milosavljevic** (SOLEIL)

L'appel à soutien financier sera lancé en 2020 sur la base des crédits alloués, et nous pensons ventiler environ la moitié des crédits normalement reçus sur ces actions scientifiques collaboratives.

Enfin, suite au sondage effectué courant 2018 au sein de la communauté et aux informations recueillies, nous avons contacté les directeurs du GDR SpecMo afin de mettre en place un atelier thématique sur la chimie des atmosphères (Terre et planètes). Ceux-ci ont répondu favorablement à notre initiative et ont proposé à Ha Tran (LISA) et Robert Georges (IPR) de porter le projet, joints par Sophie Sobanska (ISM) pour EMIE. Le format proposé est similaire à nos actions passées, soit 2 demi journées, EMIE et SpecMo s'engageant à soutenir l'événement de quelques milliers d'euros chacun. L'atelier se tiendra à l'automne 2020.

5. Evolutions thématiques et prospective

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. Les évolutions thématiques sont celles proposées à l'occasion du nouveau renouvellement (voir ci-dessus) et sont en lien avec l'atelier sur la physico-chimie des atmosphères ainsi que les problématiques liés à l'énergie. Elles seront détaillées plus avant au sein du document déposé auprès des instances fin janvier, dont les rédacteurs principaux seront la nouvelle équipe porteuse de projet.