

Bulletin du mois de mars 2018

Editorial

À l'occasion du premier numéro 2018 du bulletin du GDR ThéMS nous félicitons Danielle Doweck, physicienne à l'ISMO (Orsay) lauréate du prix Félix Robin 2017 pour ses travaux exceptionnels en physique atomique et moléculaire. (<https://www.sfpnet.fr/danielle-doweck-laureate-du-prix-felix-robin-2017>).

Nous saluons aussi la création d'une nouvelle UMR localisée sur les deux sites de Nancy et Metz (voir la rubrique dernières nouvelles du GDR), qui associe deux groupes de Chimie et de Physique Théoriques et qui n'est pas sans rappeler les motivations scientifiques à l'origine de la constitution de notre GDR. Nous inaugurerons avec eux dans la prochaine livraison de notre bulletin une nouvelle rubrique consacrée à la présentation des recherches effectuées par une ou deux équipes de recherche du GDR THÉMS. Nous vous suggérons de proposer d'ores et déjà votre équipe pour une de nos prochaines livraisons.

Nous vous invitons à répondre aux nouveaux appels d'offre 2018 de financement pour l'organisation de congrès ainsi que pour les visites inter groupe. N'hésitez pas non plus à davantage répondre à l'appel à contribution au bulletin du GDR, afin de donner à chacun(e) la possibilité d'informer notre communauté de réunions, soutenance, offre de thèse ou post-doc mais aussi de ses dernières recherches en envoyant simplement titre et auteurs de publications récemment acceptées.

Envoyez vos contributions à vos correspondants du bulletin dont les coordonnées sont les suivantes :

- ◆ Thème 1: Systèmes moléculaires isolés
Arnaud Leclerc : arnaud.leclerc@univ-lorraine.fr

- ◆ Thème 2: Systèmes moléculaires en présence de champs intenses
Osman Atabek: osman.atabek@u-psud.fr
Dominique Sugny : Dominique.Sugny@u-bourgogne.fr

- ◆ Thème 3: Systèmes moléculaires environnés
Sabine Morisset: Sabine.Morisset@u-psud.fr

Vous êtes aussi encouragés à consulter le site du GDR (www.gdr-thems.cnrs.fr/) qui est actualisé régulièrement

Le comité de rédaction du bulletin du GDR Thems 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

Dernières nouvelles du GDR

Création du Laboratoire de Physique et Chimie Théorique (LPCT) de l'Université de Lorraine

Message de Xavier Assfeld, directeur

C'est avec une grande fierté que je vous fais part de la création au 1er janvier 2018 d'une nouvelle UMR : le Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques, UMR CNRS UL 7019. Le laboratoire, créé au 01/01/2018, regroupe les chimistes théoriciens et les physiciens théoriciens de l'Université de Lorraine. Il contient 9 Chercheurs CNRS (sections 02 et 13 pour l'instant) et 26 Enseignants-Chercheurs (allant des sections 28 à 31 principalement). Il est organisé en cinq axes thématiques :

« Dynamique & Symétrie », « Interactions Rayonnement-Matière », « État solide : Structure et Propriétés », « Biophysique & Biochimie » et « État liquide, Interfaces, Solvatation » et deux axes transversaux : « Didactique & Epistémologie » et « Développements Théoriques et Numériques ».

Il est situé sur deux sites, l'un à la faculté des Sciences de Nancy qui compte 27 membres, l'autre au technopôle à Metz qui compte 10 membres. Les quatre premiers axes thématiques sont présents sur le site Messin.

Le but scientifique de ce laboratoire, tout en laissant chacun développer sa propre recherche, est de stimuler les échanges entre physique et chimie afin de favoriser l'émergence de nouvelles thématiques de recherche et de lever les verrous scientifiques en fonctions des compétences et connaissances personnelles de chaque membre. Tous les travaux s'appuient sur des développements théoriques et numériques afin de décrire théoriquement la matière en interaction et sont appliqués à des systèmes allant de l'atome aux systèmes mésoscopiques en passant par les molécules, les solides et les assemblages macromoléculaires.

Appel d'offres 2018 pour le soutien aux conférences

Soutien aux conférences

Le GDR THEMS propose de soutenir quelques conférences se tenant en 2018 en France, traitant des thématiques d'intérêt pour le GDR.

Attention : la date limite de la demande est fixée au 30 Mars 2018.

Merci d'adresser vos demandes à olivier.dulieu@u-psud.fr, Nadine.Halberstadt@irsamc.ups-tlse.fr et thierry.stoecklin@u-bordeaux.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-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 avril 2018.

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 2018 pour des visites entre équipes du GDR

Le GDR THEMS 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 THEMS devra être remercié dans les publications qui résulteront de cette collaboration.

La date limite de la demande est fixée au 30 Mars 2018.

Merci d'adresser vos demandes à 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 d'avril 2017.

Annonces

Congrès, écoles et colloques

HDQD, 28-31 août 2018, Lille

The High Dimensional Quantum Dynamics (HDQD) Workshop that will be held in Lille (France) from the 28th to the 31st of August 2018. Please save the date! HDQD aims at gathering scientists involved in the development and application of quantum dynamical methods to discuss the state-of-the-art and the future challenges of the field. Topics include molecular reaction dynamics, chemical control, ultrafast processes, electron dynamics, and the physics of Bose-Einstein condensates.

Please visit our website (<https://hdqd18.sciencesconf.org/>) for updates and information.

9th IMAMPC, 5-8 June 2018, Berlin, Germany

Registration is now open for the 9th International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry (IMAMPC) to be held in Berlin, Germany, from the 5th to the 8th of June 2018. Following

the previous editions, the meeting will bring together theoreticians and experimentalists, working on various topics in atomic and molecular physics and chemistry, including:

- * Macromolecules and biologically-relevant systems
- * Inelastic and reactive scattering, ultracold chemistry
- * Photochemistry and photophysics
- * Electronic structure theory and spectroscopy
- * Electron dynamics

As the original idea behind IMAMPC is to promote research work carried out by young scholars, we highly encourage PhD students, post-doctoral researchers, tenure-track fellows, and fresh permanent scientists to attend the meeting and submit their abstracts for oral and poster presentations.

More information on the meeting can be found on the conference website

https://www.helmholtz-berlin.de/events/imampc/index_en.html

International Conference on Few-Body Problems in Physics (FB22), Caen, 3-7 juillet 2018

Following tradition FB22 will cover a broad range of topics - both theoretical and experimental - with the aim of bringing together diverse communities to share and debate ideas in few-body physics.

Subjects to be covered will include:

- *Few-body aspects of atomic and molecular physics*
 - *Hadron and related high-energy physics*
 - *Strange and exotic matter, including hypernuclear physics*
 - *Few-nucleon systems, including QCD inspired approaches*
 - *Few-body aspects of nuclear physics and nuclear astrophysics*
 - *Interdisciplinary aspects of few-body physics and techniques*
-

CCP5 Summer School 2018, Lancaster University, 8th July - 17th July 2018

Organised by CCP5 and sponsored by the CECAM organisation, this School is intended for newcomers to the science of molecular simulation and will provide a comprehensive introduction to the methodology, practical sessions on computational methods and examples of the power and versatility of simulation methods. An optional two day programming course will be available at extra cost, see registration form on 7th and 8th July 2018. Students can choose between Introduction to Fortran or Introduction to Python. These two extra days will be restricted to 20 participants only so please provide a justification if you want to participate.

For more details and registration please visit the school website:

https://www.ccp5.ac.uk/summer_school_2018

MOLEC 2018 : 22nd European Conference on Dynamics of Molecular Systems (Dinard : 26 au 31 août 2018)

Below is a list of confirmed speakers. There will also be a number of oral contributions, selected from abstracts submitted before the 15th of May 2018. Early bird registration fees will apply up to the 15th of June. Registration will close on the 20th of July or earlier if there are no places left at the conference center.

To register and submit your abstract please visit the conference website

<https://molec2018.sciencesconf.org>

Confirmed speakers include

Gil Alexandrowicz, Haifa (Israel)

Astrid Bergeat, Bordeaux (France)

Francesca Calegari, Hamburg (Germany)

Florent Calvo, Grenoble (France)

Adam Chatterley, Aarhus (Denmark)

Alexandre Faure, Grenoble (France)

Hua Guo, Albuquerque (USA)

Brianna Heazlewood, Oxford (UK)

Uwe Manthe, Bielefeld (Germany)

Frédéric Merkt, Zurich (Switzerland)

Hanns-Christoph Nägerl, Innsbruck (Austria)

David Parker, Nijmegen (Netherlands)

Octavio Roncero, Madrid (Spain)

Michael S. Schuurman, Ottawa (Canada)

Arthur Suits, Columbia (USA)

J. Peter Toennies, Göttingen (Germany)

Hans-Joachim Werner, Stuttgart (Germany)

Roland Wester, Innsbruck (Austria)

Stefan Willitsch, Basel (Switzerland)

Contact molec2018@univ-rennes1.fr

MPS, 21-24 août 2018, Budapest

The next International Conference on Many Particle Spectroscopy of Atoms, Molecules, Clusters and Surfaces (MPS-2018) will be held from 21-24 August 2018 in the Danubius Hotel Flamenco, Budapest. Hungary. MPS is a biannual meeting, which deals with physical and chemical phenomena induced by the interaction of charged particles (singly up to highly charged ions, atoms and clusters, electrons) and photons with atoms, molecules, clusters and surface and the bulk of solids and also liquids. The aim is to promote the growth and exchange of scientific information on these areas of atomic and molecular and surface physics. The most recent meetings have been held in Moscow (Russia, 2016) Metz (France, 2014), Berlin (Germany, 2012), Sendai (Japan, 2010), Paris (France, 2008), Rome (Italy, 2006).

website : <http://www.ekho94.hu/en>

Offres de thèses

Leiden (Experimental reaction dynamics)

Two fully funded 4-year PhD student positions in the field of experimental reaction dynamics are available at the Leiden Institute of Chemistry, Leiden University (UL), and at the FELIX Laboratory of Radboud University (RU), Nijmegen, both in the Netherlands.

The full project entails a combined experimental-theoretical approach of gas phase CO₂ reacting with metallic Cu particles and single crystals. The two PhD positions predominantly entail experimental research. The main goal is to gain fundamental insight into the structure dependence of the initial elementary steps in the conversion of CO₂ into useful chemicals, e.g. CH₃OH, over Cu-based catalysts. The PhD project in Nijmegen initially uses FELIX to study the CO₂ adsorption reaction on gas phase Cu clusters. The PhD project in Leiden initially uses supersonic molecular beams and curved single crystals of Cu. The two PhD projects merge toward the end through combined study of the reactivity of CO₂ on well-defined deposited Cu particles. Supplementary quantum chemical computations will be performed by a PD at that time. The research will be performed in close collaboration between the groups of dr. Joost Bakker (RU), dr. Ludo Juurlink (UL) and dr. Jörg Meyer (UL), with additional collaboration with prof. dr. Marc Koper (UL) and dr. Irene Groot (UL).

Candidates with an excellent background in chemical physics or physical chemistry and strong affinity with experimental research are strongly encouraged to apply. Basic knowledge or experience with ultra-high vacuum (UHV), mass-spectrometry and/or laser-based techniques is beneficial.

For applications, please send a letter of motivation, a resume and contact information of at least two persons willing to provide a letter of support to both dr. Ludo Juurlink (juurlinklbf@chem.leidenuniv.nl) and dr. Joost Bakker (j.bakker@science.ru.nl). These are also the addresses where additional information can be obtained regarding specifics of the PhD positions.

Offre de stage post doctoral

Offre de poste d'ATER (Université Paris Saclay)

Un ½ poste ATER est ouvert pour enseigner au département de physique de l'Université d'Evry val d'Essonne – Université Paris Saclay et est conditionné à réaliser la recherche associée avec le groupe du Prof Marie-Pierre Gageot au laboratoire LAMBE UMR8587.

La personne recrutée rejoindra le groupe en travaillant sur l'un des sujets en cours consistant en des applications de la méthode de dynamique moléculaire ab initio de type DFT-MD pour :

1) La modélisation d'interfaces solide/eau liquide et air/eau liquide contenant des électrolytes et/ou molécules organiques, et participera aux travaux en cours sur la structure de l'eau interfaciale aux interfaces hydrophobes/hydrophiles, le calcul/interprétation des spectres SFG (Sum Frequency generation) de ces interfaces, et la réactivité chimique à ces interfaces. Collaborations notamment en

lien direct avec les expériences des Dr E. Backus MPI Allemagne, Prof E. Borguet Temple Univ USA, Prof Y.R. Shen UC Berkeley USA, Prof M. Havenith Univ Bochum Allemagne. 4 thèses en cours sur ces sujets dans le groupe.

2) La modélisation des spectres anharmoniques THz de biomolécules en phase gazeuse en relation avec les expériences de la Dr A.M. Rijs du FELIX Laboratory aux Pays-Bas. Ce travail est la suite d'une thèse soutenue dans le groupe en décembre 2017.

L'expertise en recherche du candidat doit être en simulations de dynamique moléculaire (ab initio et/ou classique), et le/la candidat/te doit être capable d'enseigner en L1-L3 du cursus de Physique (typiquement mécanique classique, électrostatique, thermodynamique). Plus de renseignements possiblement disponibles sur le site web <http://mpgaigeot-research.fr/> rubriques Jobs, Research et Publications.

Les candidatures doivent parvenir très rapidement à mgaigeot@univ-evry.fr et impérativement avant le 2 Avril 2018. Début du contrat au 1/9/2018. Merci d'envoyer un CV complet incluant la date de soutenance de thèse (date prévue si thèse non soutenue), une lettre de motivation pour le sujet choisi, et 3 noms de personnalités à contacter pour références.

Postes permanents

Ouverture d'un poste de professeur à Metz, section CNU 30, Laboratoire de Physique et Chimie Théoriques

Descriptif du poste : Le candidat développera son projet de recherche en l'intégrant dans l'architecture du laboratoire, en montrant les complémentarités avec les activités actuellement développées en local (physique atomique et moléculaire, physique et chimie quantiques, ...) et en indiquant des possibilités de collaborations internes au laboratoire avec les parties physiques et chimiques. Des compétences en développement théorique et/ou numérique ainsi qu'un solide réseau de collaborations internationales sont des atouts importants. Il est hautement recommandé de prendre contact au préalable. Les candidats seront invités à donner un séminaire avant le concours et à découvrir l'environnement de travail.

Le candidat devra être capable d'occuper des fonctions au service de la communauté et devra donc posséder de sérieuses qualités de communication, d'organisation et de management. De plus, il devra être capable de lever les fonds suffisants pour financer ses recherches en répondant aux divers appels d'offre compétitifs.

Enseignement : UFR SciFA – Département Physique Electronique. Les enseignements concernent principalement les filières de la Licence Physique, du master de Physique Appliquée et Ingénierie Physique (PAIP) et des portails de première année, sur le site de Metz.

Contacts recherche : xavier.assfeld@univ-lorraine.fr ou ugo.ancarani@univ-lorraine.fr

Contact enseignement : stephane.dalmasso@univ-lorraine.fr

Ouverture d'un poste de Maître de conférences à l'Université de Paris-est Marne la vallée

Le/la Maître de Conférences recruté(e) sera accueilli(e) au laboratoire Modélisation et Simulation Multi-Echelle (MSME – UMR 8208 du CNRS) dans l'équipe de Chimie Théorique. Cette équipe est reconnue pour ses travaux sur l'étude précise des structures électroniques, de la spectroscopie, de la dynamique des systèmes moléculaires, et de leurs interactions en/avec des milieux complexes. Elle intervient également dans tous les axes transverses du laboratoire MSME.

Le/la MCF recruté(e) devra avoir des compétences reconnues soit dans le domaine de la structure électronique de systèmes moléculaires de petite et moyenne tailles, isolés ou confinés, ou dans le domaine des interactions moléculaires (molécule- molécule, molécule-surface, molécule-agrégat ou/et molécule- protéine) ou encore en spectroscopie rovibrationnelle haute résolution ou en dynamique. Il/elle devra également participer aux thématiques transversales du laboratoire.

Profil enseignement :

La personne recrutée enseignera dans les formations de l'Institut Francilien des Sciences Appliquées (<http://ifsa.u-pem.fr/>). Le/la MCF devra disposer d'une formation « généraliste » en physique et physico-chimie moléculaire. Il/elle pourra intervenir par exemple dans les modules suivants : physique atomique et nucléaire, physique fondamentale, atomistique, spectroscopie et mécanique quantique, et aussi dans les modules de physique de la licence Physique-Chimie : cinématique et dynamique du point, optique géométrique et ondulatoire, thermodynamique, électromagnétisme, ondes et vibrations. Il/elle sera amené(e) à enseigner tant en cours et travaux dirigés qu'en travaux pratiques.

Toute expérience d'enseignement de la physique ou physico-chimie en licence sera appréciée. Une participation active aux travaux engagés pour adapter la formation à de nouvelles exigences est attendue : prise en compte de la réforme des lycées d'un côté (pédagogie adaptée en première année de licence) et maintien du niveau d'exigence pour répondre aux prérequis des masters de l'autre. Il lui sera demandé d'intervenir également au niveau Master (e.g. Master Chimie) dans l'enseignement plus spécifique de spectroscopie et de ses applications, de modélisation, de chimie et physique quantique. Il/Elle sera amené(e) à élaborer des travaux pratiques en licence et en master dans le cadre de l'offre de formation de l'UPEM.

Personnes à contacter :

Directeur de l'unité de recherche MSME : salah.naili@u-pem.fr

Directeur de la composante IFSA : Stephanie.Rossano@u-pem.fr

Personne à contacter pour l'aspect enseignement IFSA : Sylvain.Fautrat@u-pem.fr

Dépôt des dossiers :

Les dossiers de candidature doivent être déposés sur l'application de recrutement accessible à cette adresse : <https://recrutement-ec.u-pem.fr/>

Aucun dossier papier ne sera accepté.