

Bulletin du mois de juin 2018

Éditorial

Cette nouvelle Edition inaugure la nouvelle rubrique **Focus** de notre bulletin consacrée au nouveau laboratoire de Physique et Chimie Théorique de l'université de Lorraine dont nous vous annonçons la création dans notre dernière livraison. Elle fait par ailleurs suite à la réunion semestrielle du GDR du comité scientifique qui a lieu le 30 Mai à Paris au siège de la société Française de Physique et a arrêté les décisions suivantes :

* Décision de financement des congrès en 2018:

Daniel Pelaez-Ruiz :	HDQD Lille 2018-05-30	750 euros
Ugo Ancarani :	MES 2018	750 euros
François Lique :	Workshop-Anions Corse-Juin-2018	500 euros

* Un nouvel appel à financement de missions entre groupes pour le deuxième semestre 2018 va être émis prochainement.

* Un échange a eu lieu avec l'équipe de Dijon qui prépare la réunion 2018 du GDR les 8 et 9 Novembre à Dijon. L'intervention consacrée à la présentation des stéréotypes de genre, proposée par Nadine Halberstadt au congrès 2017 à Metz est programmée au cours de ces journées

Les conférenciers invités pour les trois thèmes ayant accepté sont pour le moment:

Theme 1 : Astrid Bergeat

Theme 2 : Pierre Béjot et Sabrina Patsch (PhD)

Theme 3 : Geert-Jan Kroes(Leiden) et Mariana Rosi (Berlin)

Une réunion du bureau est prévue durant la réunion du GDR.

Un appel à volontaire sera fait avant le congrès pour l'organisation d'une école CNRS en 2020. Une discussion à ce propos est prévue durant le congrès.

Autres points discutés :

* En 2018 lancement du programme Psi2 à Saclay avec la création de l'Institut Pascal qui proposera l'organisation de programmes thématiques de quelques semaines à plusieurs mois et l'accueil de scientifiques y participant : <https://www.universite-paris-saclay.fr/fr/institut-pascal>

Le GDR peut donc envisager de proposer l'organisation d'une école dans ce cadre en 2021. Un premier projet (DIMCOM) sera portée dans ce cadre par Laurent Wiesenfeld.

* Un appel à projet pour l'organisation d'une école CECAM sera aussi proposé très prochainement. La date limite de soumission est le 16 Juillet 2018

Un projet de formation d'un GDR international consacré à la méthode MCTDH a été présenté par Fabien Gatti

Enfin, un nouveau lien sur le site du GDR permettra de consulter les livraisons anciennes du bulletin du GDR.

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

Journées du GDR TheMS, 8-9 novembre 2018, Dijon

Les prochaines Journées scientifiques du GDR TheMS auront lieu à Dijon, à l'Hôtel Kyriad Dijon-Est-Mirande, du jeudi 8 novembre vers 10h au vendredi 9 novembre jusqu'à environ 16h. Une circulaire plus précise sera envoyée d'ici fin juin.

Organisateurs : Maxence Lepers, Grégoire Guillon, Pascal Honvault, Dominique Sugny.

Focus sur...

...Le laboratoire de Physique et Chimie Théoriques

UMR 7019 - CNRS - Université de Lorraine

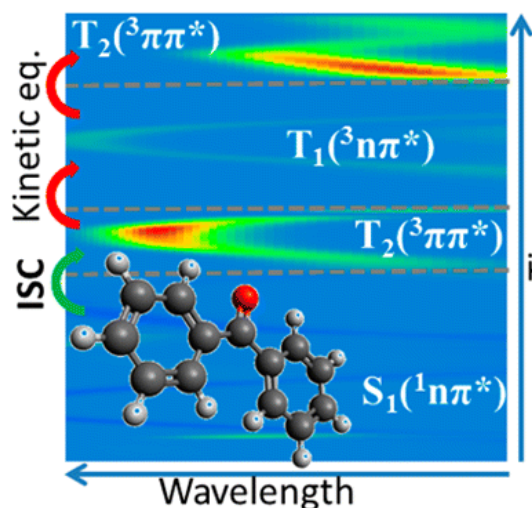
Axe "Interaction rayonnement-matière"

Les interactions entre la matière et le rayonnement électromagnétique sont à la base des nombreux phénomènes cruciaux dans le domaine de la physique et de la chimie avec des retombées importantes dans le cadre de la biologie ou de la science des matériaux. D'un point de vue plus fondamental la compréhension de ces interactions représente un vrai défi scientifique car il s'agit d'un véritable problème multi-échelle en termes de taille, des énergies mise en jeu et des échelles de temps qui lui sont propres.

C'est dans ce cadre que l'axe thématique « Interaction Rayonnement Matière » du laboratoire de Physique et Chimie Théoriques développe son activité. En particulier il se propose d'obtenir une véritable description des phénomènes d'interaction entre la matière et le rayonnement pour des systèmes allant de simples édifices moléculaires composés de quelques atomes aux systèmes biologiques complexes tel que les protéines ou les acides nucléiques. De plus l'axe thématique associe aux applications de fort impact une activité de développement méthodologique originale.

Une des activités historiques de l'axe a été l'étude très précise des collisions ionisantes, qui nécessitent de bien décrire les états électroniques liés et ceux du continuum, dans ce contexte une activité originale a été le développement des fonctions de bases spécifiques dite Sturmiennes.

Plus récemment des algorithmes capables de réduire drastiquement le coût de calculs de spectre vibrationnels numériquement exacte ont été développés. Dans une ligne de recherche similaire le contrôle laser des spectres de résonance à été abordé, permettant notamment de procéder à des transferts sélectifs d'états ou de contrôler la photodissociation par des valeurs spécifiques des paramètres du laser.



Une autre activité importante de l'axe concerne l'étude des phénomènes photophysiques et photochimiques dans les systèmes moléculaires complexes, notamment en ce qui concerne le transfert de charge et d'énergie. En particulier la prise en compte des effets d'environnements et le couplage avec les effets dynamiques et vibrationnels sont largement poursuivis. Dans ce contexte l'équipe effectue des études de dynamique non-adiabatique permettant notamment de suivre l'évolution temporelle des états électroniques excités et donc de prédire les temps caractéristiques et les rendements quantiques d'important phénomènes photoinduits, ainsi que de revoir certains modèles cinétiques établis comme cela a été le cas pour la benzophénone.
image extraite de Marazzi et al.

J. Phys. Chem. Lett. 2016, 7, 622

Dans ce contexte une des activités principales de l'équipe a été l'étude de la photosensibilisation des systèmes biologiques tels que l'ADN ou les membranes lipidiques. Le couplage avec un échantillonnage efficace de l'espace conformationnel de ces systèmes complexe a permis de révéler des effets dus à l'environnement et capables de contrôler le processus photophysique. Notamment, les études ont permis de rationaliser le comportement des médicaments utilisés en photothérapie ou à l'inverse les effets phototoxiques de médicaments largement utilisés comme l'ibuprofène et donc de proposer des stratégies de protection plus strictes.

Pour finir l'équipe s'intéresse aussi à la conversion d'énergie solaire par le biais de cellules photovoltaïques à colorants ou des dispositifs de type « water splitting » ce qui encore une fois permet de rationaliser les phénomènes photophysiques agissant aux interfaces complexes entre colorants et systèmes solides et donc de proposer un design rationnel des dispositifs.

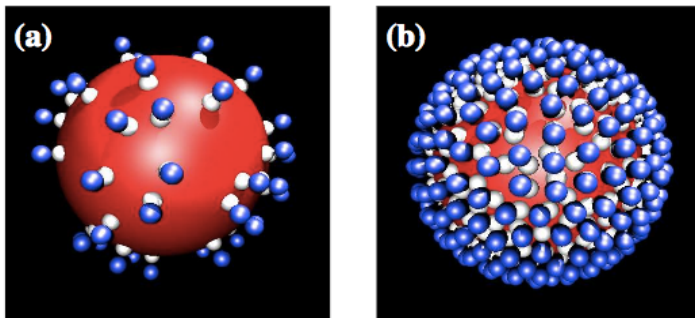
Axe "Dynamique et symétrie"

Un des plus grands défis de la physique moderne concerne la compréhension des phénomènes collectifs. En effet, même si les lois fondamentales qui gouvernent le mouvement d'une particule sont parfaitement connues, il est souvent très difficile d'en déduire le comportement d'un grand nombre de particules qui interagissent les unes avec les autres. Pour citer un exemple familier : le mouvement d'une molécule d'eau est déterminé par les équations du mouvement qui ont été découvertes par Newton au XVIIIe siècle. Mais ces équations sont-elles suffisantes pour comprendre pourquoi l'eau liquide se change en glace quand la température descend en-dessous de zéro degré Celsius ?

La réponse est : oui et non. Oui parce que, en théorie, en disposant d'ordinateurs avec une capacité de calcul infinie, on pourrait faire une gigantesque simulation numérique du mouvement de 10^{23} molécules d'eau (environ le nombre de molécules contenues dans un verre d'eau), et observer que les

molécules s'organisent peu à peu en un cristal. Non parce qu'une telle simulation nécessiterait des ressources inimaginables et un temps de calcul supérieur à l'âge de l'univers.

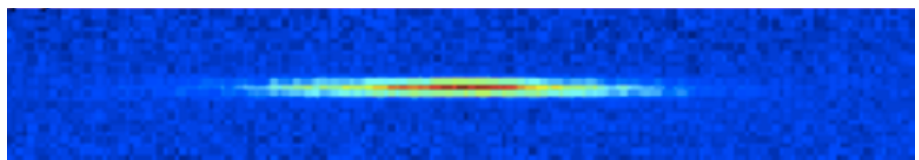
La physique moderne essaie de contourner ce problème. Que l'on souhaite développer de nouveaux matériaux superconducteurs, ou comprendre le plasma de quarks et de gluons qui existait dans les premiers instants de l'univers, c'est toujours le même problème qui revient : on veut déterminer le comportement collectif de très nombreuses particules à partir des lois qui gouvernent leur mouvement microscopique. Les membres de l'axe « dynamique et symétries » contribuent à l'effort international sur cette question en développant de nouvelles méthodes pour modéliser des systèmes physiques concrets.



René Messina (Professeur à l'Université de Lorraine et membre du LPCT) travaille par exemple sur les phénomènes d'auto-organisation d'ions ou colloïdes chargés (ou magnétiques). Quand des charges électrostatiques répulsives sont confinées sur une surface (comme par exemple une sphère, voir illustration), elles s'organisent de manière à maximiser leur distance

mutuelle et ainsi minimiser leur énergie. A basse température, elles forment alors une structure régulière : un cristal. Quand la température augmente, l'agitation thermique fait que chaque particule se déplace autour de son minimum d'énergie local donnant lieu à un liquide fortement corrélé. A haute température, le système finit par se désorganiser complètement. René Messina étudie ce type de phénomènes électrostatiques en lien avec la chimie et la biologie.

Dragi Karevski (Prof. UL), Jérôme Dubail (Chargé de recherche au CNRS) et Alexandre Faribault (Maître de Conférences à l'UL), développent de nouvelles techniques pour modéliser les comportements collectifs de systèmes où les lois de Newton sont remplacées par celles de la mécanique quantique. Par exemple, une collaboration est actuellement en cours avec une équipe expérimentale de l'Institut d'Optique à Palaiseau pour essayer de comprendre la dynamique d'un gaz formé de 10^4 atomes de Rubidium refroidis à une température très proche du zéro absolu (de l'ordre du nanoKelvin - voir l'image, obtenue par l'équipe



d'Isabelle Bouchoule à Palaiseau, d'un nuage de Rubidium unidimensionnel-). Ce gaz acquiert un comportement spectaculaire quand il est confiné dans un piège magnétique qui a la forme d'un cigare très allongé : il ne s'équilibre alors jamais, et reste perpétuellement en mouvement. La modélisation de ce gaz quantique a grandement progressé dans l'année passée, grâce aux travaux des membres de l'axe et de leurs collaborateurs au Royaume-Uni, aux Pays-Bas et en Italie.

Références :

[René Messina, « Electrostatics in soft matter », Journal of Physics: Condensed Matter 21 \(11\), 113102](#)

[Jérôme Dubail, « A more efficient way of describing interacting quantum particles in 1d », Physics 9, 153, 2016](#)

Annonces

Appel à projets

Workshops et écoles thématiques du CECAM

L'appel à projets pour les workshops et écoles thématiques du CECAM est ouvert et sera clôturé le 16 juillet prochain. Les événements devront se dérouler entre avril 2019 et mars 2020. Les workshops traditionnels durent habituellement 3 jours avec entre 20 et 35 participants. Les écoles durent habituellement 5 jours avec entre 30 et 40 participants.

Vous trouverez toutes les informations utiles sur le lien suivant

<https://www.cecarn.org/submitting.html>

Congrès, écoles et colloques

Oxygen in Space (16-17 octobre 2018, Neuville sur Oise)

After hydrogen, oxygen is the second most abundant reactive element. The reduction-oxidation reaction is one of the pillars of chemistry, on Earth and in space. The present workshop focuses on the role and form of oxygen in astrophysical environments. During two days, the elusive presence of molecular oxygen in the Interstellar Medium and its unexpectedly high abundance in comets will be discussed. A session devoted to proxy molecules such as NO, SO and sulfur-substituted molecules will take place. The last part of the workshop will be devoted to the hydrogenated forms of oxygen (such as water and methanol), with a special attention to their deuterated isotopologues. Observational, modelling, and laboratory aspects will be included in the discussion.

The workshop will be located at the Maison Internationale de la Recherche in Neuville-sur-Oise, 45 minutes by train from the center of Paris (France). The participation is free of fees and is limited to 60 participants, by order of registration. About half of the time will be devoted to contributions.

<http://laboratoires.u-cergy.fr/~lerma/OxygenInSpace/index.html>

3rd IRTG CoCo Summer School, (29 juillet-3 août 2018, Brand, Autriche)

The registration deadline for the 3rd IRTG CoCo Summer School on "Coherent Dynamics of Cold Molecular Ensembles : Theoretical and Experimental Methods" has been extended to June 30, 2018. The school will be held on July 29 – August 3, 2018 at Brand bei Bludenz, Austria. Further information, program, and registration pages are available on the website:

<https://www.irtg-coco.uni-freiburg.de/irtg-coco-summer-school-2018>

MOLEC2018 (26-31 août 2018, Dinard)

Early bird registration deadline: 15th of June.

The registration fees cover on-site accommodation for the 5 nights from Sunday 26th August to Friday 31st August. Abstract submission closes on the 12th July.

The detailed scientific program is now available on the conference website.

<https://molec2018.sciencesconf.org>

HDQD 2018 (28-31 août 2018, Lille)

Registration deadline: 15th of June.

We would like to strongly encourage the participation of Ph.D. students to promote scientific exchange with more senior researchers. Financial support for accommodation and travel will be obtainable upon availability. The program consists of Plenary Lectures, Invited Talks, Contributed Talks, and Posters. Participants can apply for either oral or poster contributions.

HDQD aims at gathering scientists involved in the development and application of quantum dynamical methods for high dimensional systems to discuss the state-of-the-art and the future challenges of the field.

<https://hdqd18.sciencesconf.org/>

Offres de stages post doctoraux

Paris, Ecole Normale Supérieure

Chemical reactivity of graphene oxide (GO) in condensed phase by first-principles methods

Post-Doctoral Project, starting flexible ideally before 2019

Hosting Team : Pole Physicochimie théorique , laboratoire PASTEUR UMR7182,

Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75005 PARIS

The objective of the project is to investigate the chemical reactivity of GO layer dipped into different condensed phases encountered in nanofluidic experiments, using state-of-the-art Density Functional Theory tools. Candidates should have a background in quantum chemistry methods for extended systems like materials and/or interfaces. Please send your CV including full list of publications and the name of two referees you have worked with.

Direct Supervisor : Marie-Laure Bocquet marie-laure.bocquet@ens.fr