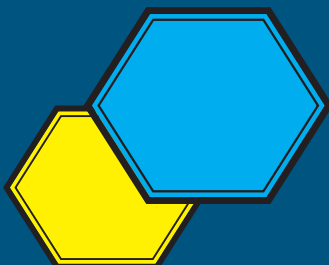
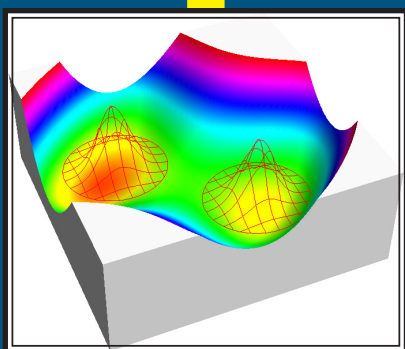
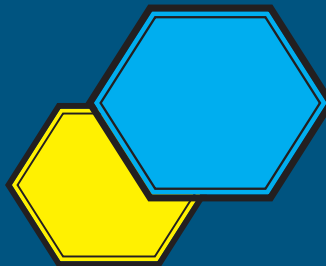
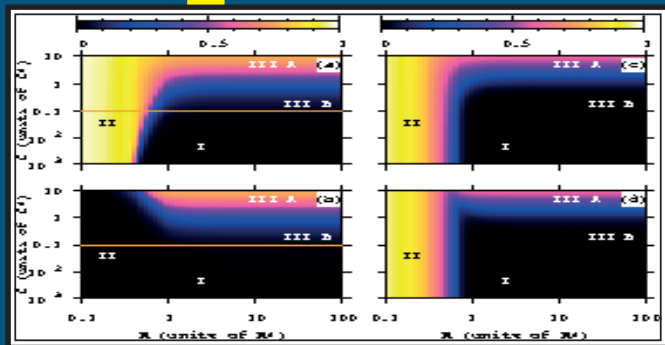
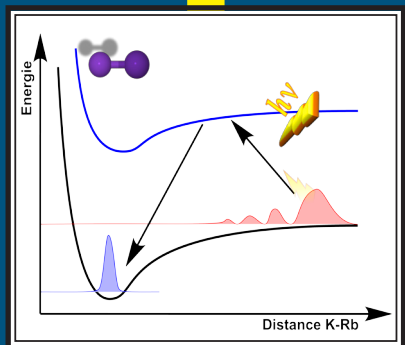


17 - 18 Décembre 2013
Laboratoire de Chimie Physique
Faculté des Sciences d'Orsay
Bât. 349

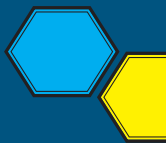


Journées scientifiques du GDR ThéMS

Dynamique quantique
dans les systèmes moléculaires.
Théorie modélisation simulation.



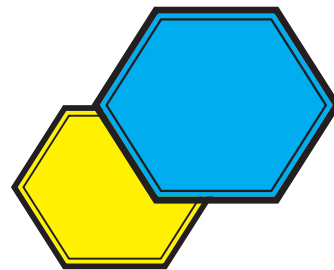
<http://www.gdr-thems.cnrs.fr>





Journées scientifiques du GDR ThéMS

PROGRAMME
Mardi 17 décembre 2013



12 h 00 - 14 h 00 : accueil, repas, café

14 h 00 - 14 h 20 : introduction par Olivier Dulieu

Axe 3 « Systèmes moléculaires environnés »

Animateur : Maurice Monnerville

- > **14 h 20-14 h 40 :** « Quelques exemples de dynamique moléculaire quantique à Toulouse pour des systèmes environnés » par Nadine Halberstadt
- > **14 h 40-15 h 00 :** « DFT calculations for van der Waals interactions » par Romain Guéroul
- > **15 h 00-15 h 20 :** « Theoretical investigation on the Eley–Rideal recombination of nitrogen on Tungsten(100) » par Pascal Larregaray
- > **15 h 20-15 h 40 :** « Méthodes pour les 'grands' systèmes et modélisation de spectroscopie vibrationnelle d'action : intégrales de chemin et thermostats quantiques » par Florent Calvo
- > **15 h 40-16 h 00 :** « Approches quantiques pour la modélisation des effets d'environnement » par Claude Millot

16 h 00-16 h 30 : pause-café

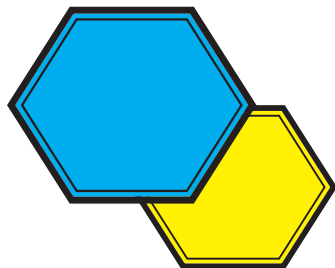
Axe 1 « Systèmes moléculaires isolés »

Animateur : Pascal Honvault

- > **16 h 30-16 h 50 :** Equipe SMPCA (Dijon), thématiques, méthodes et projets: des collisions réactives au Monte Carlo quantique par Grégoire Guillon
- > **16 h 50-17 h 10 :** « Collisions moléculaires ultra-froides en champ électrique et réseau optique » par Goulven Quémener
- > **17 h 10-17 h 30 :** « Quantum scattering calculations for sympathetic cooling experiments » par Maykel Gonzalez-Martinez
- > **17 h 30-17 h 50 :** « Quelques applications des méthodes de dynamique quantique inélastique en l'absence ou en présence de champ électromagnétique appliqué » par Thierry Stoecklin
- > **17 h 50-18 h 10 :** « Des surfaces de potentiel à la spectroscopie et à la dynamique à travers l'étude de ArNO⁺ et de N₂H⁻ » par Majdi Hochlaf
- > **18 h 10-19 h 10 :** posters-discussions

20 h 00-22 h 00 : Dîner au restaurant





Journées scientifiques du **GDR ThéMS**

PROGRAMME
Mercredi 18 décembre 2013



Axe 3 « Systèmes moléculaires environnés »

Animatrice : Dominique Billy

- > **9 h 00-9 h 20** : « **Équipe PCMT : Résultats et projets en Physicochimie de l'atmosphère et du milieu interstellaire** » par Maurice Monnerville
- > **9 h 20-9 h 40** : « **Dynamique gaz-surface, collage et formation de molécules sur les surfaces** » par Sabine Morisset
- > **9 h 40-10 h 00** : « **Chimie des hydrures interstellaires : Formation, Excitation et Destruction** » par Francois Lique

Axe 2 « Systèmes moléculaires en présence de champ électromagnétique intense »

Animatrice : Nadine Halberstadt

- > **10 h 00-10 h 20** : « **Dynamique quantique à l'aide de l'approche MCTDH. Possibilités d'applications** » par Fabien Gatti

10 h 20-10 h 50 : pause-café

- > **10 h 50-11 h 10** : « **Développement des techniques de contrôle optimal: un défi pour la dynamique quantique** » par Dominique Sugny
- > **11 h 10-11 h 30** : « **Dynamics and control of open quantum systems: Charge transfer at an heterojunction and control of an isomerization** » par Aurélie Chenel

Axe 1 « Systèmes moléculaires isolés »

Animateur : Andrea Simoni

- > **11 h 30-11 h 50** : « **Highly excited rovibrational states: interface between molecular spectroscopy and dynamics** » par Vladimir Tyuterev
- > **11 h 50-12 h 10** : « **Ionisation de molécules par impact d'électrons ou photons** » par Ugo Ancarani

12 h 10-14 h 00 : repas-café

- > **14 h 00-14 h 45** : table ronde et prospectives

15H00 fin réunion



