

## PARTICIPANTS

O. Alwan osman.alwan@hotmail.com  
H. Ancarani ancarani@univ-metz.fr  
M. C. Bacchus marie-christine.bacchus@univ-lyon1.fr  
A. Beswick beswick@irsamc.ups-tlse.fr  
L. Bonnet claude-laurent.bonnet@u-bordeaux.fr  
F. Calvo florent.calvo@univ-lyon1.fr  
C. Crespos c.crespos@ism.u-bordeaux1.fr  
O. Denis Alpizar otonieldenisalpizar@gmail.com  
M. Desouter Michele.Desouter-Lecomte@u-psud.fr  
A. Devolder adevolde@ulb.ac.be  
O. Dulieu olivier.dulieu@u-psud.fr  
F. Dumouchel fabien.dumouchel@univ-lehavre.fr  
R. El Mir rayanelmir@gmail.com  
C. Granados carlosmwh@gmail.com  
M. Gonzalez maykel.gonzalez-martinez@u-psud.fr  
G. Guillon Gregoire.Guillon@u-bourgogne.fr  
O. Galparsoro-Larrazza  
N. Halberstadt Nadine.Halberstadt@irsamc.ups-tlse.fr  
M. Hernandez marhvera@gmail.com  
P. Halvick p.halvick@ism.u-bordeaux1.fr

M. Hochlaf Majdi.Hochlaf@u-pem.fr  
Y. Justum yves.justum@u-psud.fr  
J. Klos jklos@umd.edu  
B. Lasorne Benjamin.Lasorne@univ-montp2.fr  
P. Larregaray pascal.larregaray@u-bordeaux.fr  
D. Lauvergnot David.Lauvergnot@u-psud.fr  
A. Leclerc arnaud.leclerc@univ-lorraine.fr  
D. Lemoine didier.lemoine@irsamc.ups-tlse.fr  
M. Lepers maxence.lepers@u-psud.fr  
B. Lepetit bruno.lepetit@irsamc.ups-tlse.fr  
F. Lique francois.lique@univ-lehavre.fr  
E. Mangaud Etienne.Mangaud@irsamc.ups-tlse.fr  
R. Marquardt roberto.marquardt@unistra.fr  
M. Monnerville maurice.monnerville@univ-lille1.fr  
L. Oliveira oliveiralf@gmail.com  
D. Pelaez-Ruiz Daniel.Pelaez-Ruiz@univ-lille1.fr  
A. Perveaux aurelie.perveaux@hotmail.fr  
G. Quemener goulven.quemener@u-psud.fr  
J. Schneider ioan.schneider@univ-lehavre.fr  
T. Stoecklin t.stoecklin@ism.u-bordeaux1.fr  
M. Vacher morgane.vacher@imperial.ac.uk



journées scientifiques du GDR *ThéMS* :  
(<http://www.gdr-thems.cnrs.fr/>)

Dynamique quantique dans les systèmes moléculaires :  
Théorie, modélisation, simulation

(Bordeaux, 9-10 décembre 2014)  
([http://web.ism.u-bordeaux1.fr/gdr\\_thems/index.php](http://web.ism.u-bordeaux1.fr/gdr_thems/index.php))



**Organisateurs :**

- Thierry Stoecklin, Pascal Larregaray, Cédric Crespos

**Lieu:**

Salle de conférence 3eme étage Est, Bat A12  
Institut des Sciences Moléculaires, UMR5255-CNRS  
Université de Bordeaux, 351 Cours de la libération,  
33405 Talence Cedex.



université  
de BORDEAUX

## Journées scientifiques du GdR ThÉMS

<b>Mardi 09/12</b>	
12 :00-14 :00	Accueil et Déjeuner
14 :00-14 :10	Introduction par Olivier Dulieu
	<b>Thème 1 : Systèmes Moléculaires isolés</b>
	Modérateur : Grégoire Guillon
14 :10-14 :30	<b>Collisions ultra-froides de molécules polaires dans des états rotationnels excités</b> Goulven Quemener
14 :30-14 :50	<b>Etude théorique et expérimentale de la collision inélastique NO+Kr.</b> Jacek-Antoni Klos
14 :50-15 :10	<b>Approche « Close Coupling » du couplage pliage- rotation des molécules triatomiques en collision inélastique avec un atome : application aux systèmes HCN-He; DCN-He et C<sub>3</sub>-He.</b> Otoniel Denis-Alpizar
15 :10-15 :30	<b>Excitation collisionnelle des cyanures et isocyanures interstellaires.</b> Mario Hernandez-Vera
15 :30-15 :50	<b>Études vibrationnelles à haute dimension dans le cadre de MCTDH.</b> Daniel Pelaez-Ruiz
15 :50-16 :20	Pause Café
	Modérateur : Didier Lemoine
16 :20-16 :40	<b>Dynamique quantique avec des grilles creuses</b> David Lauvergnat
16 :40-17 :00	<b>Calcul de spectres vibrationnels à coût mémoire réduit en optimisant des fonctions de base en sommes de produits.</b> Arnaud Leclerc
17 :00-17 :20	<b>Implémentation de fonctions Sturmienne généralisées pour étudier l'ionisation d'atomes et molécules.</b> Carlos Granados
17 :20-17 :40	<b>Résonances et effets multi-cœurs pour les collisions réactives entre électrons et cations moléculaires.</b> Ioan Schneider
17 :40 -19 :00	Poster
20 :30	Diner



## Journées scientifiques du GdR ThÉMS

Mercredi 10/12	
	<b>Thème 2 : Systèmes Moléculaires en présence de champ électromagnétique.</b>
	Modérateur : Marie Christine Bacchus-Montabanel
9 :00-9 :20	<b>Interactions à longue portée entre molécules ultra froides en présence de champ électromagnétique.</b> Maxence Lepers
9 :20-9 :40	<b>Simulateur quantique de dynamique moléculaire à partir des états vibrationnels d'un ion piégé.</b> Michele Desouter-Lecomte
9 :40-10 :00	<b>Formalisme statistique pour les réactions ultra froides en présence de champs externes.</b> Maykel Gonzalez-Martinez
10 :00-10 :20	<b>Modèle photochimique multidimensionnel: Application à l'Aminobenzonitrile et au Benzopyran.</b> Aurélie Perveaux
10 :20-10 :40	<b>Dynamique couplée electron-noyau succédant à l'ionisation du benzene.</b> Morgane Vacher
10 :40-11 :00	<b>Stratégies diabatiques pour la dynamique quantique photochimique.</b> Benjamin Lasorne
11:00-11 :30	Pause Café
	<b>Thème 3: Systèmes moléculaires environnés</b>
	Modérateur: Nadine Halberstadt
11 :30-11 :50	<b>Transfert d'électrons dans le cryptochrome par dynamique dissipative.</b> Adrien Devolder
11 :50-12 :10	<b>Dynamique quantique de transfert de charge dans des composés organiques à valence mixte.</b> Etienne Mangaud
12 :10-12 :30	<b>Dynamique Quantique des Particules Adsorbées: Diffusion de H sur Pd(111) et de CO sur Cu(100).</b> Roberto Marquardt
12 :30-12 :50	<b>Excitations électroniques et phononiques lors de recombinaisons ultrarapides de molécules diatomiques à la surface de métaux.</b> Oihana Galparsoro-Larraz
12 :50-13 :10	<b>Approche DFTB pour un grand nombre d'atomes : études des propriétés des agrégats et des surfaces de métaux nobles, interagissant avec des atomes d'hydrogène.</b> Luis Oliveira
13 :10-14 :30	Déjeuner
14 :30-14 :45	<b>Présentation de l'action cost MOLIM : Molecules in motion</b> Majdi Hochlaf
14 :45-16 :00	Table ronde et prospectives
16 :00	Conclusion

