

Journées scientifiques du GdR ThÉMS

| Mardi 09/12 | |
|--------------------|---|
| 12 :00-14 :00 | Accueil et Déjeuner |
| 14 :00-14 :10 | Introduction par Olivier Dulieu |
| | Thème 1 : Systèmes Moléculaires isolés |
| | Modérateur : Grégoire Guillon |
| 14 :10-14 :30 | Collisions ultra-froides de molécules polaires dans des états rotationnels excités Goulven Quemener |
| 14 :30-14 :50 | Etude théorique et expérimentale de la collision inélastique NO+Kr. Jacek-Antoni Klos |
| 14 :50-15 :10 | Approche « Close Coupling » du couplage pliage- rotation des molécules triatomiques en collision inélastique avec un atome : application aux systèmes HCN-He; DCN-He et C₃-He. Otoniel Denis-Alpizar |
| 15 :10-15 :30 | Excitation collisionnelle des cyanures et isocyanures interstellaires. Mario Hernandez-Vera |
| 15 :30-15 :50 | Études vibrationnelles à haute dimension dans le cadre de MCTDH. Daniel Pelaez-Ruiz |
| 15 :50-16 :20 | Pause Café |
| | Modérateur : Didier Lemoine |
| 16 :20-16 :40 | Dynamique quantique avec des grilles creuses David Lauvergnat |
| 16 :40-17 :00 | Calcul de spectres vibrationnels à coût mémoire réduit en optimisant des fonctions de base en sommes de produits. Arnaud Leclerc |
| 17 :00-17 :20 | Implémentation de fonctions Sturmienne généralisées pour étudier l'ionisation d'atomes et molécules. Carlos Granados |
| 17 :20-17 :40 | Résonances et effets multi-cœurs pour les collisions réactives entre électrons et cations moléculaires. Ioan Schneider |
| 17 :40 -19 :00 | Poster |
| 20 :30 | Diner |



Journées scientifiques du GdR ThÉMS

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

