

PROGRAMME de la réunion plénière du GDR 3533 EMIE 6 – 9 Octobre 2013

Dimanche 6 Octobre :

A partir de 18h00 : Accueil des participants.

19h30 : Dîner

Lundi 7 Octobre :

Chair: M.P. Gaigeot

9h00 – 9h45 : C. Bichara (CINaM) :

« Etude par simulation numérique de la croissance catalytique de nanotubes de carbone et de graphène »

9h45 – 10h15 : J. Boulon (LCAR) :

« Transition de phase dans les agrégats d'eau »

10h15 - 10h45 : Pause-café

10h45 – 11h15 : V. Brenner (LFP) :

« Relaxation électronique dans des peptides modèles en phase gazeuse, une modélisation de la stabilité photochimique des protéines »

11h15 – 11h45 : C. Ortega (ILM) :

« Refroidissement par fluorescence des cations d'hydrocarbures aromatiques polycycliques (Naphthalène, Antracène, Pyrène) et mesures de kinetic energy release »

12h30 – 14h00 : Déjeuner

Chair: A. Zehnacker

14h00 – 14h30 : S. Picaud (UTINAM) :

« Simulation d'aérosols organiques par dynamique moléculaire : vers une meilleure compréhension de la formation des nuages »

14h30 – 15h00 : G. Feraud (PIIM) :

« Electronic spectra of cold protonated aromatic amines in the gas phase »

15h00 – 15h30 : M. A. Hervé du Penhoat (IMPCM) :

« Radiation damage to biomolecules. Ab initio molecular dynamics simulations »

15h30 – 16h00 : pause café

16h00 – 18h00 : séance poster

19h30 : Dîner

Mardi 8 Octobre :

Chair 3: C. Jouvet

9h00 – 9h45 : T. Ruchon (SPAM, CEA Saclay) :

« Attosecond imaging of molecular electronic wavepackets »

9h45 – 10h15 : V. Riffet (LMR) :

« Les liaisons hydrogène, un facteur clé de la structure électronique des peptides radicaux cations »

10h15 - 10h45 : Pause-café

10h45 – 11h15 : S. Maclot (CIMAP) :

« Fragmentation d'acides aminés induit par impact d'ions : compétition entre répulsion coulombienne et transfert d'hydrogène intramoléculaire »

11h15 - 11h45: C. Toubin (PhLAM) :

« Modélisation de la synthèse de molécules organiques à la surface des grains interstellaires »

12h00 – 14h00 : Déjeuner

Chair: G. Ohanessian

14h00 – 14h30 : C. Dehon (ISMO) :

« Dynamique de photodissociation de petits peptides contenant la tyrosine »

14h30 – 15h00 : C. Iftner (LCPQ) :

« Etude théorique du benzène, neutre et cationique, dans des matrices d'argon : modèle, calibration et thermodynamique »

15h00 – 16h00 : Table ronde, animateurs F. Calvo, G. Grégoire

16h00 – 16h30 : Pause-café

16h30 – 18h00 : Séance poster 2

19h30 : Dîner

Mercredi 9 Octobre :

Chair: K. Beroff

9h00 – 9h45 : T. Pino (ISMO) :

« Poussières et grains hydrocarbonés »

9h45 – 10h15 : T.N. Le (LPL) :

« Etude structurale en phase gazeuse de biomolécules par mobilité ionique, spectroscopie IRMPD et ECD »

10h15 - 10h45 : Pause-café

10h45 – 11h15 : F. Rabilloud (ILM) :

« Modélisation quantique des propriétés optiques d'agrégats métalliques »

11h15 - 11h45: N. Shafizadeh (ISMO) :

« Etude de la relaxation des états excités des métalloporphyrines ligandées : un modèle pour la compréhension des réactions chimiques du vivant »

12h30 – 14h00 : déjeuner

14h00 : Départ des participants