

7<sup>e</sup> Journées de  
**DYNAMIQUE**  
du Sud-Ouest



JDSO 2017

Montpellier, France  
1<sup>er</sup> et 2 juin 2017

## jeudi 1 juin 2017

---

HEURES	ÉVÉNEMENT
11:45 - 13:45	Accueil des participants - buffet
14:00 - 15:00	Conférence invitée - Pr. Graham A. Worth
15:00 - 15:20	CO1 - Molecular anions: Rotational (de)-excitation and dipole bound states - Miguel Del Jesus Lara Moreno
15:20 - 15:40	CO2 - Etude théorique de la dynamique d'une nano-goutte d'hélium superfluide dopée avec un atome de potassium - Maxime Martinez
15:40 - 16:10	Pause café
16:10 - 16:30	CO3 - Détection de neurotransmetteurs par capsules fluorescentes - Rémi Pétuya
16:30 - 16:50	CO4 - Diffusion des atomes en insertion dans les systèmes cubiques à faces centrées : cas du nickel - Matthieu David
16:50 - 17:10	CO5 - Nonreactive Scattering of N <sub>2</sub> off W(100): Reconciling Experiments and Theory - Cesar Ibarquen Becerr
17:10 - 17:30	CO6 - Modelling the electronic states of polyphenylene-ethynylene - Emmeline Ho
17:30 - 19:00	Temps libre - libre
19:00 - 21:00	Session poster & Cocktail

## vendredi 2 juin 2017

---

HEURES	ÉVÉNEMENT
08:50 - 09:10	CO7 - Coupled translation-rotation bound states of molecular hydrogen in clathrate hydrates from first principles - Yohann Scribano
09:10 - 09:30	CO8 - Capture of heliophilic atoms by quantized vortices in 4He nanodroplets - François Coppens
09:30 - 09:50	CO9 - Growth of materials through vapor-like deposition process in the context of Microelectronic: understand the atomic scale to design the matter - Anne Hemeryck
09:50 - 10:10	CO10 - Etude spectroscopique d'un polluant atmosphérique: le bromure de méthyle - Adina Ceausu-Velcescu
10:10 - 10:40	Pause café
10:40 - 11:00	CO11 - Influence of the van der Waals interactions in the chemisorption of N <sub>2</sub> on W(100) - Alejandro Pena Torres
11:00 - 11:20	CO12 - Modelling Photoswitchable Organic-Graphene Hybrids - Claire Tonnelé
11:20 - 11:40	CO13 - Molecular alignment in He nano droplets - Patricia Vindel-Zandbergen
11:40 - 12:00	CO14 - Quantum description of spiropyran ring-opening dynamics - Benjamin Gonon
12:00 - 12:30	Table ronde
12:30 - 14:00	Déjeuner et départ des participants



# Table des matières

<b>Communications Orales</b>	<b>3</b>
CO1 – Molecular anions: Rotational (de)-excitation and dipole bound states., Miguel Del Jesus Lara Moreno . . . . .	3
CO2 – Etude théorique de la dynamique d’une nano-goutte d’hélium superfluide dopée avec un atome de potassium, Maxime Martinez . . . . .	4
CO3 – Détection de neurotransmetteurs par capsules fluorescentes, Rémi Pétuya	5
CO4 – Diffusion des atomes en insertion dans les systèmes cubiques à faces centrées : cas du nickel, Matthieu David . . . . .	7
CO5 – Nonreactive Scattering of N <sub>2</sub> off W(100): Reconciling Experiments and Theory, Cesar Ibarguen Becerr . . . . .	9
CO6 – Modelling the electronic states of polyphenylene-ethynylene, Emmeline Ho	10
CO7 – Coupled translation-rotation bound states of molecular hydrogen in clathrate hydrates from first principles, Yohann Scribano . . . . .	11
CO8 – Capture of heliophilic atoms by quantized vortices in 4He nanodroplets, François Coppens . . . . .	12
CO9 – Growth of materials through vapor-like deposition process in the context of Microelectronic: understand the atomic scale to design the matter, Anne Hemeryck	14
CO10 – Etude spectroscopique d’un polluant atmosphérique: le bromure de méthyle, Adina Ceausu-Velcescu . . . . .	16

CO11 – Influence of the van der Waals interactions in the chemisorption of N <sub>2</sub> on W(100), Alejandro Pena Torres . . . . .	17
CO12 – Modelling Photoswitchable Organic-Graphene Hybrids, Claire Tonnelé . . . . .	18
CO13 – Molecular alignment in He nano droplets, Patricia Vindel-Zandbergen . . . . .	19
CO14 – Quantum description of spiropyran ring-opening dynamics, Benjamin Gonon . . . . .	21
<b>Communications par Affiches</b>	<b>23</b>
Détermination des propriétés structurales et électroniques d'un nouveau matériau inorganique, Nour El Houda Belkafouf . . . . .	23
Distribution de l'eau dans le site actif de l'oncoprotéine NRas par dynamique QM/MM, Marie Brut . . . . .	24
Modélisation globale et compacte de surfaces d'énergie potentielle, Yann Cornaton . . . . .	25
Analyse des mouvements globaux dans les enzymes GST, Pierre Ghesquiere . . . . .	26
Theoretical Study of Unidirectional Exciton Transfer in Phenylene-Ethynylene Dendrimers, Emmeline Ho . . . . .	27
Ultrafast Heme-CO dissociation triggered by strong vibronic couplings, Miquel Huix-Rotllant . . . . .	28
AGAPES - an efficient potential energy surface generation method using valence coordinates, Falk Richter . . . . .	29
Effect of a dc bias field on the nonlinear complex susceptibility and dynamic magnetic hysteresis of antiferromagnetic nanoparticles, Bachir Ouari . . . . .	30
<b>Liste des participants</b>	<b>31</b>
<b>Liste des sponsors</b>	<b>33</b>

# Molecular anions: Rotational (de)-excitation and dipole bound states.

Miguel Del Jesus Lara Moreno <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – CNRS : UMR5255, Université Sciences et Technologies - Bordeaux I, Université Montesquieu - Bordeaux IV, École Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux (ENSCP) – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

Since their recent detection in the interstellar medium, anions have raised the question of their possible mechanisms of formation, destruction and excitation. Radiative electron attachment is thought to be the most probable mechanism of formation. A key point for this hypothesis is the abundance ratio  $[A^-]/[A]$  for these anions is estimated to be approximately 1 % . There are however at the moment a lack of experimental and theoretical data allowing to assess this hypothesis. Among the observed anions, we will focus our attention on C<sub>3</sub>N<sup>-</sup> and C<sub>4</sub>H<sup>-</sup>. To improve the measurement of the abundance ratio of C<sub>3</sub>N<sup>-</sup> a quantum mechanical treatment of the rotational (de)-excitation by collisions with He and H<sub>2</sub> is reported. Full close-coupling calculations are performed within the rigid rotor approximation and rate coefficients for the rotational transitions among the first 31 levels of C<sub>3</sub>N<sup>-</sup> are obtained for temperatures between 1 and 300 K. Calculations of the ro-vibrational bound states are carried out by using a discrete variable representation method based on Sturmian functions. The first theoretical predictions of the absorption spectra for the van der Waals complexes in the microwave region is also provided.  $[C_4H^-]/[C_4H]$  ratio is most elegantly explained by the dipole-bound formation hypothesis. No dipole-bound state was found for C<sub>4</sub>H  $2\Sigma$  ground state conversely to its low-lying  $2\Pi$  excited state which own a large dipole moment enough to capture the additional electron. The calculated C<sub>4</sub>H<sup>-</sup> dipole-bound state energy have been found to be in good agreement with the experimental observations.

# Etude théorique de la dynamique d'une nano-goutte d'hélium superfluide dopée avec un atome de potassium

Maxime Martinez<sup>1</sup>, François Coppens<sup>1</sup>, Manuel Barranco<sup>2,1</sup>,  
Nadine Halberstadt<sup>1</sup>, Martí Pi<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire Collisions Agregats Reactivite (LCAR) – Université Paul Sabatier [UPS] - Toulouse III, CNRS : UMR5589, Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III – 31062 Toulouse cedex 04 - France, France

<sup>2</sup> Universitat de Barcelona, Institute of Nanoscience and Nanotechnology (IN2UB) – Departament FQA, Facultat de Física, and IN2UB, Universitat de Barcelona, Diagonal 645, 08028 Barcelona, Spain, Espagne

Le but de cette étude est d'étudier la dynamique de photo-désorption d'un seul atome de potassium à la surface d'une nano-goutte d'hélium superfluide à l'aide des outils de simulation les plus récents et performants.

# Détection de neurotransmetteurs par capsules fluorescentes

Rémi Pétuya<sup>1</sup>, Nicolas Fantozzi<sup>2</sup>, Sandra Pinet<sup>2</sup>, Emilie Guenin<sup>2</sup>,  
Patrice Bordat<sup>1</sup>, Alexandre Martinez<sup>3</sup>, Isabelle Gosse<sup>2</sup>, Didier Bégué<sup>1</sup>,  
Isabelle Baraille<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut des sciences analytiques et de physico-chimie pour l'environnement et les matériaux (IPREM) – Université de Pau et des Pays de l'Adour, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5254 – Université de Pau et des Pays de l'Adour, HélioParc Pau Pyrénées, 2 avenue du Président Angot, 64053 PAU CEDEX 9, France

<sup>2</sup> Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – Université Sciences et Technologies - Bordeaux 1, École Nationale Supérieure de Chimie et de Physique de Bordeaux (ENSCP), Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5255 – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

<sup>3</sup> Institut des Sciences Moléculaires de Marseille (ISM2) – Aix Marseille Université : UMR7313, Ecole Centrale de Marseille : UMR7313, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7313 – Campus Saint Jérôme Av. escadrille Normandie Niemen BP 531 13397 MARSEILLE CEDEX 20, France

Une déficience ou un déséquilibre des neurotransmetteurs dans le système nerveux central est avancée comme hypothèse dans le développement des maladies neurodégénératives.[1] Par exemple, l'altération des transmissions cholinergiques serait responsable de certains symptômes de la maladie d'Alzheimer. Cependant, en raison d'un manque d'outils de suivi temps-réel et espace-réel des neurotransmetteurs dans les systèmes biologiques, les mécanismes sous-jacents à ces dysfonctionnements sont à ce jour encore méconnus. Le projet[2] auquel nous contribuons en collaboration avec des chimistes organiciens et des biologistes a pour objectif de fournir et caractériser des capsules fluorescentes, structure d'hémicryptophane, capables de capturer ces neurotransmetteurs, intrinsèquement non-fluorescents, afin de permettre leur détection et suivi par imagerie fonctionnelle. Dans un premier temps notre rôle dans ce projet consiste à étudier et caractériser les interactions de type hôte/invité entre les capsules et les neurotransmetteurs afin d'obtenir une ou plusieurs structures d'équilibres.[3] Considérant la taille des systèmes d'étude, environ 190 atomes pour le complexe hémicryptophane/neurotransmetteur, nous avons fait le choix d'utiliser la dynamique moléculaire avec champ de force réactif (reaxFF)[4,5] afin de caractériser notre système. La seconde partie du travail consistera à calculer les propriétés photo-physiques du complexe.

1. Coyle, J. T., Price, D. L., & DeLong, M. R. (1983). Alzheimer's disease: a disorder of cortical cholinergic innervation. *Science (New York, N.Y.)*, 219(4589), 1184–90.

2. Projet ANR-15-CE18-0018 EVIDENCE/Programme AAP Innovation Biomédicale 2015. Eriau-Peyrard, L., Coiffier, C., Bordat, P., Bégué, D., Chierici, S., Pinet, S., ... Brown, R. (2015). Selective, direct detection of acetylcholine in PBS solution, with self-assembled fluorescent nano-particles: experiment and modelling. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 17(6), 4168–4174.

3. Van Duin, A. C. T., Dasgupta, S., Lorant, F., & A., G. W. (2001). ReaxFF: A Reactive Force Field for Hydrocarbons. *Journal of Physical Chemistry A*, 105(41), 9396–9409.

4. Chenoweth, K., van Duin, A. C. T., & Goddard, W. A. (2008). ReaxFF Reactive Force Field for Molecular Dynamics Simulations of Hydrocarbon Oxidation. *The Journal of Physical Chemistry A*, 112(5), 1040–1053.



# Diffusion des atomes en insertion dans les systèmes cubiques à faces centrées : cas du nickel

Matthieu David \* <sup>1</sup>, Daniel Daniel<sup>†</sup>, Damien Connétable<sup>‡</sup> <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Centre interuniversitaire de recherche et d'ingénierie des matériaux (CIRIMAT) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, CNRS : UMR5085, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT – CIRIMAT, CNRS, INPT, UPS, 4, allée Emile Monso, BP 44362, 31030 Toulouse Cedex 4, France, France

De nombreux mécanismes physico-chimiques tels que la ségrégation aux interfaces, les transformations de phases, les processus de fragilisation des alliages métalliques ou encore les cinétiques de dissolution d'éléments se basent sur la connaissance des mécanismes de diffusion des différentes espèces en solution dans le réseau. La connaissance des processus de diffusion des différentes espèces impliquées dans l'oxydation à haute température peut être importante pour comprendre et prédire l'évolution des propriétés mécaniques des super-alliages à base de nickel dans des atmosphères oxydantes. Par exemple, plusieurs observations expérimentales suggèrent que la présence de carbone, d'hydrogène ou encore de lacunes, même en très faible quantité, pourraient modifier de manière significative la perméabilité de l'oxygène dans les systèmes métalliques [1]. Plusieurs études expérimentales ont permis de déterminer les coefficients de diffusion des espèces O [2–5] et H [6, et voir les références citées] au sein de systèmes métalliques à base de nickel. Mais cette connaissance globale de la diffusion ne permet pas de découpler les différents mécanismes physiques pouvant intervenir à l'échelle atomique. Par ailleurs, en dehors de O et H, les coefficients de diffusion d'autres interstitiels tels que C et de N dans le nickel sont beaucoup plus rare.

Nous nous proposons ici de présenter une étude des mécanismes de diffusion des différents atomes en insertion dans les cfc au moyen d'une approche multi-physique. À l'échelle atomique, la DFT est utilisée pour calculer les grandeurs caractéristiques des processus élémentaires (énergies de migration et fréquences de saut), et un modèle analytique du coefficient de diffusion sera proposé en fonction des différentes configurations obtenues. Les résultats seront comparés avec des résultats de simulations KMC. Enfin nous aborderons la stabilité des amas constitués d'une lacune et d'un élément interstitiel, et de l'influence de la présence de la lacune sur les mécanismes de diffusions des éléments interstitiels.

1. S. Pérusin. Experimental Study of the Interactions Between Oxidation and Structural Defects. Materials Science Forum, 461 :123–130, 2004.
2. Jong-Wan Park and Carl J Altstetter. The diffusion and solubility of oxygen in solid nickel. Metallurgical Transactions A, 18(1) :43–50, 1987.

---

\*Auteur correspondant: matthieu.david@ensiacet.fr

†Auteur correspondant: daniel.monso@ensiacet.fr

‡Auteur correspondant: damien.connetable@ensiacet.fr

3. G. J. Lloyd and J W Martin. The Diffusivity of Oxygen in Nickel Determined by Internal Oxidation of Dilute Ni-Be Alloys. *Metal Science Journal*, 6 :7–11, 1972.
4. Shoji Goto, Koji Nomaki, and Sigeyasu Koda. Internal oxidation of nickel alloys containing a small amount of chromium. *JAP INST METALS J*, 31(4) :600–606, 1967.
5. R Barlow and P. J. Grundy. The Determination of the Diffusion Constants of Oxygen in Nickel and alpha-iron by an Internal Oxidation Method. *Journal of Materials Science*, 4 :797–801, 1969.
6. H Vehoff. Diffusion of hydrogen in metals. *Hydrogen in Metals III*, 73 :51–91, 1997.

# Nonreactive Scattering of N<sub>2</sub> off W(100): Reconciling Experiments and Theory

Cesar Ibarguen Becerr<sup>1</sup>, Larregaray Pascal<sup>1</sup>, Crespos Cedric<sup>1</sup>,  
Peña-Torres Alejandro<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Theoretical Chemistry & Modeling Group- ISM Bordeaux – Université de Bordeaux (Bordeaux, France) – Université de Bordeaux 351 Cours de la Libération Bâtiment A12, 3ème étage F-33405 Talence CEDEX Fax: +33(0)5 4000 6645, France

The nonreactive scattering of N<sub>2</sub> off W(100) is studied by means of quasi-classical trajectory simulations making use of a recently developed DFT-based potential energy surface (PES) relying on the vdW-DF2 functional. Dynamics are simulated within the Born-Oppenheimer Statistical Surface (BOSS) adiabatic approximation and the Generalized Langiven Oscillator (GLO) approach. The evolution of the widths of the in-plane scattering angle distributions, as a function of collision energy, shows a good agreement with experiments, in particular at low incidence energies. When allowing dissipation to surface motion within GLO, the scattering-angle-resolved final translational energies are also well reproduced. These results contrast with previous simulations using a PES based on the PW91 functional. The improvement is rationalized in terms of the topologies of both potential energy surfaces.

# Modelling the electronic states of polyphenylene-ethynylene

Emmeline Ho \* <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Charles Gerhardt - Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux de Montpellier (ICG ICMMM) – CNRS : UMR5253, Université de Montpellier, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier – Bâtiment 15 - CC1501 Place Eugène Bataillon - 34095 Montpellier cedex 5, France

Hydrocarbon dendrimers are macromolecules experimentally well-known for their interesting optoelectronic properties[1]. Phenylene-ethynylene (PE) dendrimers behave as light-harvesting antennae in which unidirectional exciton transfer occurs along a series of linear, conjugated building blocks connected *via* the *meta*-substitution of phenylene rings. Thus, PE dendrimers have received much interest as artificial photosynthetic systems. Recent theoretical investigations based on semi-classical dynamics simulations[2] have indicated that the unidirectional energy transfer involves a cascade of conical intersections between excited states localized on different linear fragments. Yet, the calculations of potential energy surfaces (PES) remains out of reach for any level higher than semi-empirical, due to the size of the systems.

Previous investigations using TD-DFT calculations showed that the electronic states involved in the energy transfer are almost pure single excitations localised on linear fragments, which allows a first-order description in terms of near-frontier  $\pi$ -orbitals. Calculations based on the extended Hückel approach confirmed that the frontier molecular orbitals (FMOs) of linear PEs (i) are dominated by the interaction between the FMOs of the fragments of benzene and acetylene (ii) bear some similarity with polyene chains when the number of units increases. In addition, we analysed the dependence of the FMOs on the main geometrical deformations occurring during electronic transitions. This work is the basis for a semi-empirical-type model to be used ultimately in quantum dynamics simulations of energy transfer processes.

1.S.F. Swallen, R. Kopelman, J.S. Moore, and C. Devadoss, *Journal of Molecular Structure* 485–486 (1999) 585–597.

2. S. Fernandez-Alberti, V. D. Kleiman, S. Tretiak, and A. E. Roitberg, *J. Phys. Chem. A* 113 (2009) 7535–7542.

---

\*Auteur correspondant: emmeline.ho@umontpellier.fr

# Coupled translation-rotation bound states of molecular hydrogen in clathrate hydrates from first principles

Yohann Scribano<sup>1</sup>, David Lauvergnat<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire Univers et Particules de Montpellier (LUPM) – CNRS : UMR5299, Université Montpellier II - Sciences et techniques, IN2P3 – Université de Montpellier II Place Eugène Bataillon - CC 72 34095 Montpellier Cédex 05, France

<sup>2</sup> Laboratoire de Chimie Physique – UMR CNRS 8000 - Université de Paris-Sud, Orsay – France

The study of small/medium size molecules inside nanoscale cavities of diverse host material, e.g., clathrate hydrates, cryogenic fluids (or superfluids), fullerenes, carbon nanotubes and zeolites, has received a great deal of attention over the past years due to their broad application domain (condensed matter physics, nanomaterial sciences, geoscience, quantum chemistry, astrophysical and planetary sciences, biophysics, ...).

However the description of such systems is often far from complete. Indeed, in such nanoscale confinement, the translational center-of-mass motions of the caged molecules are quantized and strongly coupled to the molecular rotations, which are quantized too. To interpret experimental data, theoretical tools are useful but we need to go beyond the simple harmonic approximation as the guest molecule presents very large amplitude motions (translation and rotation) and its interaction with the nanoscale cavity can be far from harmonic. A rigorous quantum treatment of the intricate coupled translation-rotation (TR) dynamics of the caged diatomic molecules is far from a routine task.

In this contribution, I will present recent methodological development based on the concept of Smolyak sparse grid technic for the rigorous quantum treatment of the intricate coupled translation-rotation (TR) dynamics of the molecular hydrogen in water clathrates.

# Capture of heliophilic atoms by quantized vortices in $^4\text{He}$ nanodroplets

François Coppens <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire Collisions Agregats Reactivite – Université Paul Sabatier - Toulouse 3, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5589 – 31062 Toulouse cedex 04 - France, France

Recent experiments have shown evidence that quantized vortices in superfluid helium induce coalescence of solvated impurities, which become trapped along their cores, eventually resulting in the formation of nano-sized filaments, thus pointing forward to a potentially new method of producing nanowires and nanotubes. Moreover, doping vortices with impurities has emerged as a valuable practical tool to image the vortex presence and dynamics, especially in the presence of vortex tangles and vortex reconnections.

In this work we present results obtained within TDDFT for the collision and capture of Xe and Ar atoms by a droplet, consisting of 1000  $^4\text{He}$  atoms, at different kinetic energies and impact parameters.

Due to the relevance of the interaction of foreign impurities with quantized vortices, special attention is paid to the time-dependent interaction of Xe and Ar atoms with helium nanodroplets hosting a vortex line.

- We study the capture of Xe atoms by a  $^4\text{He}$  nanodroplet, both for head-on collisions and for different impact parameters, with velocities ranging from thermal values up to several hundreds m/s. The results of peripheral collisions with different values of the impact parameter are used to estimate the cross section for the Xe capture;

- We study how a Xe atom dynamically interacts with a droplet hosting a vortex line, under different initial conditions resulting in different velocity regimes of the impurity as it collides with the vortex core:

- (i) a Xe atom initially located in the interior of the droplet and close to the vortex core;
- (ii) a Xe atom initially at rest on the droplet surface sinking under the effect of solvation forces;
- (iii) a head-on collision of Xe and Ar atoms against the nanodroplet.

We find that Xe and Ar atoms at thermal velocities are readily captured by helium droplets, with a capture cross section similar to the geometric cross section of the droplet.

Also, upon capture, during 50 ps the Xe (or Ar) atom wanders in the bulk of the droplet at velocities of a few tens of m/s. If the droplet hosts a vortex line along the diameter of the droplet, the thermal impurity is captured by the vortex line.

We have found that the capture is helped by an additional energy transfer from the impurity to the droplet as compared to a capture by a non-vortical state; indeed, large amplitude

displacements of the vortex line take place in the course of the capture of the impurity by the vortex, constituting the main source of the kinetic energy lost by the impurity.

In short, what is of fundamental interest is that at thermal energies, most of the impurity energy is lost in the collision process. Then, if the impact parameter is such that the impurity is captured, there are two facts that contribute to the eventual meeting and capture of the Xe/Ar atom and the vortex line, namely that the vortex line is fairly robust (angular momentum conservation) and remains near the droplet symmetry axis, and that the equilibrium position of Xe/Ar is in the bulk of the droplet.

# Growth of materials through vapor-like deposition process in the context of Microelectronic: understand the atomic scale to design the matter

Mathilde Guiltat <sup>1</sup>, Nicolas Salles <sup>1</sup>, Marie Brut <sup>1</sup>, Georges Landa <sup>1</sup>,  
Anne Hemeryck <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes [Toulouse] (LAAS) – Université Paul Sabatier - Toulouse 3, Centre National de la Recherche Scientifique : UPR8001 – 7 Av du colonel Roche 31077 TOULOUSE CEDEX 4, France

Mastering interfacial layers is the current challenge for nanotechnologies when materials are directly integrated into devices. Interfacial layers are inevitably formed during technological fabrication notably during vapor-like deposition processes. As integrated layers now reach a nanometer thickness, atomistic composition and structure of the interfacial layers become preponderant and play a determining role on the macroscopic properties of designed materials. To push forward the nanoscale-controlled fabrication of integrated materials, predictive atomic scale modeling of the deposition process can help, by providing a fundamental description on how they are achieved. It appears as a challenging task, since dynamics involved in matter organization span a large range of time and size scales.

To overcome this issue, multi-levels modelling approach is strategic [1-5]. Here, Density Functional Theory-based (DFT) calculations [6] or DFT/ART coupling [7] (Activation Relaxation Technique) are first used to identify and characterize, kinetically and thermodynamically, atomic scale events, and then are implemented as input parameters to parameterize a kinetic Monte Carlo (KMC) model. KMC methodology is well identified for the simulation of the growth of materials with an atomistic insight. It allows to carry out simulations by varying deposition parameters and predict influence of these parameters on interfacial layer formation.

In this presentation, I will describe how this strategy is developed on deposition of CuO on Al(111) and on silicon oxidation. As activation barriers are the key parameters for a good calibration of kMC methodology, a focus will be given on atomistic investigation: the dynamic features relative to atomic diffusion (notably the activation barriers) during the interface growth are highly dependent on local physical properties.

1. Bottom-up modeling of Al/Ni multilayer combustion: effect of intermixing and role of vacancy defects on the ignition process, A. Hémercyck, J.-M. Ducéré, C. Lanthony, A. Estève, C. Rossi, M. Djafari Rouhani, D. Estève, *Journal of Applied Physics* 113 (2013) 204301.
2. A computational chemist approach to gas sensors: Modeling the response of SnO<sub>2</sub> to CO, O<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O gases- J.-M. Ducéré, A. Hémercyck, A. Estève, M. Djafari Rouhani, G. Landa, P. Menini, C. Tropis,



- A. Maisonnat, P. Fau, B. Chaudret, *Journal of Computational Chemistry* 33 (2012) 247.
3. Atomic scale modeling to understand how matter organizes during growth of ultrathin materials in close relation with elaboration process parameters: climbing the scales, A. Hémercyck, M. Guiltat, N. Salles and N. Richard,, IEEE Nanotechnology Materials and Devices Conference, Toulouse, France, 9-12 October 2016
4. Mathilde Guiltat, PhD, Université Paul Sabatier (2016)
5. A kinetic Monte Carlo study of the initial stage of silicon oxidation: basic mechanisms-induced partial ordering of the oxide interfacial layer, A. Hémercyck, A. Estève, N. Richard, M. Djafari Rouhani, G. Landa, *Surface Science* 603 (2009) 2132.
6. Fundamental steps towards interface amorphization during silicon oxidation, A. Hémercyck, A. Estève, N. Richard, M. Djafari Rouhani, Y.J. Chabal, *Physical Review B* 79 (2009) 035317.
7. Strain-driven diffusion process during silicon oxidation investigated by coupling Density Functional Theory and Activation Relaxation Technique, N. Salles, N. Richard, N. Mousseau and A. Hemeryck, submitted in *Journal of Chemical Physics*

# Etude spectroscopique d'un polluant atmosphérique: le bromure de méthyle

Adina Ceausu-Velcescu\*<sup>1</sup>, Fridolin Kwabia Tchana<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Université de Perpignan – Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique – France

<sup>2</sup> Université Paris-Est Créteil (LISA) – Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique, Centre National de la Recherche Scientifique - CNRS – France

CH<sub>3</sub>Br (bromure de méthyle) est un halogénométhane ayant à la fois des sources naturelles (il est produit naturellement dans les océans) et anthropogéniques. Il a été utilisé notamment en tant que biocide et synthétisé industriellement par la réaction du méthanol avec l'acide bromhydrique. Sa production a certes diminué, comme le prévoit le Protocole de Montréal, mais reste toutefois un sujet sensible: certains pays, comme les Etats-Unis, ont en effet trouvé le moyen de contourner les directives du Protocole par un "usage contrôlé" de ce produit. De plus, ses sources naturelles sont encore insuffisamment connues et quantifiées.

Les bases de données spectroscopiques telles que GEISA ou HITRAN ont déjà inclus le bromure de méthyle, mais la région spectrale concernée est relativement étroite, de 700 à 1700 cm<sup>-1</sup> seulement. Aussi, aucune bande harmonique ou de combinaison n'est incluse à ce jour, même si l'intensité de telles bandes peut être importante. Ces bandes sont en effet d'une importance cruciale dans la modélisation satisfaisante du spectre d'absorption dans le moyen et proche infrarouge.

Nous proposons ici une étude complète de la poyade vibrationnelle  $v_6=2/v_2=v_3=1/v_3=v_5=1$ , avec la description précise des interactions anharmoniques et de Coriolis et l'attribution, pour la première fois, de transitions de vibration-rotation appartenant à la bande  $v_3+v_5$ . La reproduction de l'ensemble des données (nombres d'ondes des transitions) est d'une précision comparable à la précision expérimentale.

---

\*Auteur correspondant: adina@univ-perp.fr

# Influence of the van der Waals interactions in the chemisorption of N<sub>2</sub> on W(100)

Alejandro Pena Torres<sup>1</sup>, Fabio Busnengo<sup>2</sup>, Pascal Larregaray<sup>3</sup>, Cédric Crespos<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – Université de Bordeaux (Bordeaux, France) – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

<sup>2</sup> Instituto de Física Rosario (IFIR) – Ocampo y Esmeralda, Rosario (2000), Argentine

<sup>3</sup> Institut des Sciences Moléculaires, U. Bordeaux/ CNRS (ISM) – CNRS, Université Bordeaux – 351 cours de la libération, 33405 Talence cedex, France

<sup>4</sup> Institut des Sciences Moléculaires (ISM) – CNRS : UMR5255, Université de Bordeaux (Bordeaux, France) – Bâtiment A 12 351 cours de la Libération 33405 TALENCE CEDEX, France

The dissociative adsorption of N<sub>2</sub> on W(100) is theoretically investigated by means of quasi-classical trajectory simulations making use of a density functional theory-based potential energy surface constructed using the vdW-DF2 functional. In this work, the resulting quasi-classical dynamics calculations are compared to those obtained using the PES built with the PW91 functional as well as to the available experimental data. An overall similar topology is found for both potential energy surfaces, however, including the van der Waals functional causes changes in the height of the potential barriers and the deepness of the wells observed before, leading to a different behaviour of the dynamics. A qualitative agreement with experiments is found for the first time for the chemisorption studied.

# Modelling Photoswitchable Organic-Graphene Hybrids

Claire Tonnelé <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut des Sciences Moléculaires – Université de Bordeaux (Bordeaux, France) – France

Despite the recent advances in graphene-based electronics, several challenges still need to be addressed for real applications in electronics to flourish. Aiming at the design of a new generation of graphene-organic hybrid materials exhibiting multifunctional properties, we use classical molecular dynamics (MD) simulations to set up a model for the structural organization of 2D material-based light-responsive field-effect transistors incorporating photoresponsive self-assembled monolayers (SAM) between the 2D material and either metallic electrodes or gate dielectrics. The organization at both interfaces is of crucial importance for the description of charge injection/extraction/transport and assessing the overall device characteristics. Quantum-chemical validated force-field MD simulations are performed to characterize the SiO<sub>2</sub>/SAM/graphene structure (tilt angle, structural disorder..) and model the photoswitching.

# Molecular alignment in He nano droplets

Patricia Vindel-Zandbergen <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire Collisions Agregats Reactivite (LCAR) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III – 31062 Toulouse cedex 04 - France, France

The alignment of molecular species by strong non-resonant laser fields has been widely used within the last decade and has proven to be very useful in many applications in molecular science. For a de-tailed review of this methodology and its applications, see e.g.[1] and references therein.

After the strong pulse interaction leading to alignment, the subsequent dynamics is then given by the time evolution of the free rotor states, which for short times typically shows a strong dephasing, leading to an almost isotropic orientational distribution. However, for an isolated system, due to the discreteness of the spectrum, and the finite number of excited rotational states involved, the rotational wave packet rephases at well-defined later times, leading to the same aligned state as at the initial time (rotational revivals). This method has the advantage of providing a field free alignment of molecules at these times.

The phenomena of revivals depends crucially on the coherent evolution of the rotational wave packet, and as such forms a sensitive tool to study the interaction with a weakly interacting environment. In this perspective, the method of adiabatic alignment within a helium droplet offers an extremely interesting aspect: to which extent can a superfluid helium environment lead to decoherence of the rotational states? This question has recently been addressed experimentally, and as surprising result, they found the rotational dynamics much slower than that of isolated molecular species and the absence of the rotational revivals characteristic of gas phase molecules [2, 3, 4]. In order to shine light on this process, we perform numerical simulations of the adiabatic laser alignment of CH<sub>3</sub>I within the helium droplet.

As a first step, we analyze the CH<sub>3</sub>I molecule with a single helium atom. To describe the intermolecular interaction, we use a potential composed of a sum over CH<sub>3</sub>-He, I-He and He-He terms obtained by fitting to ab initio calculations. These potentials are then used for quantum dynamical propagations, including the laser pulses chosen according to the above cited experiments, to model the adiabatic alignment, and its modification due to the presence of a single helium atom.

Based on this full quantum mechanical wave packet describing the rotor dynamics together with the motion of the helium, we analyze the rotational decoherence by tracing out the degrees of freedom of the helium, and we directly model the observed alignment signal, to compare with the experiments presented in Ref. [2].

As an outlook, on the basis of this work, we discuss the possibility to model the molecular alignment within superfluid helium droplets within the framework of density functional theory, such as used by the Barcelona group [5].

1. H. Stapelfeldt and T. Seideman 2003 Rev. Mod. Phys. 75 543-557
2. D. Pentlehner, J.H. Nielsen, A. Slenczka, K. Mølmer and H. Stapelfeldt 2013 Phys. Rev. Lett. 110 093002
3. D. Pentlehner, J.H. Nielsen, L. Christiansen, A. Slenczka and H. Stapelfeldt 2013 Phys. Rev. A 87 063401
4. L. Christiansen, J.H. Nielsen, D. Pentlehner, J.G. Underwood and H. Stapelfeldt 2015 Phys. Rev. A 92 053415
5. M. Barranco et al. 2006 J. Low Temp. Phys. 142 1

# Quantum description of spiropyran ring-opening dynamics

Benjamin Gonon\*<sup>1,2</sup>, Benjamin Lasorne<sup>1</sup>, Fabien Gatti<sup>3</sup>, David Lauvergnat<sup>4</sup>, Gabriel Karras<sup>2</sup>, Franck Billard<sup>2</sup>, Bruno Lavorel<sup>2</sup>, Olivier Faucher<sup>2</sup>, Stéphane Guérin<sup>2</sup>, Edouard Hertz<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CTMM, Institut Charles Gerhardt Montpellier, F-34095 Montpellier Cedex 5, France – CTMM – France

<sup>2</sup> Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne (LICB) – Université de Bourgogne – Université de Bourgogne - 9 avenue Alain Savary - BP 47870 - 21078 Dijon Cedex, France

<sup>3</sup> Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay (ISMO) – Université Paris-Sud - Paris 11, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8214 – Université Paris-Sud 91405 Orsay cedex, France

<sup>4</sup> Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-Sud and CNRS, UMR 8000, 91405 Orsay, France – LCP – France

The purpose of this work is to understand and control the light induced ring opening of spiropyran molecules. This mechanism is characterized by a femtosecond time scale explained by a non-radiative decay at a conical intersection.[1] Thus we investigate the insight of this dynamic process by non-adiabatic quantum dynamics.

We construct coupled electronic potential energy surfaces taking into account dynamical electronic correlation at a post-CASSCF ab-initio level (XMCQDPT2 [2]). This is a particularly tedious task because of the strong anharmonicity of the surfaces, on the one hand, and of the need to describe correctly the topography and non-adiabatic couplings around the conical intersection on the other hand. To this end, we set up a general approach restricted to a few degrees of freedom containing the essential physical properties of the system.

We use the Multi Configuration Time Dependent Hartree (MCTDH) approach to perform non-adiabatic quantum dynamics simulation. With that, we simulate the experiments currently carried out in the group of Dijon (FRANCE), studying the ring-opening process by femtosecond spectroscopy coupled with LASER pulse control. These experiments already demonstrated the ultrafast time scale of the process and proved the possibility to change the yields, specifically using quantum interferences created by LASER coherent light.

Simulations show good agreement with this experimental absorption spectrum and dynamics time scale. Moreover, preliminary results tend to reproduce the effect of the control LASER pulse on the reactivity.

1. L. Joubert-Doriol, B. Lasorne, D. Lauvergnat, H. D. Meyer & F. Gatti, A generalised vibronic-coupling hamiltonian model for benzopyran. *The Journal of Chemical Physics*, **2014**, *140*(4), 044301
2. A. Granovsky, Extended multi-configuration quasi-degenerate perturbation theory : The new approach to multi-state multi-reference perturbation theory. *Journal of Chemical Physics*, **2011**, *134*(21), 214113

---

\*Auteur correspondant: benjamin.gonon@umontpellier.fr





# Détermination des propriétés structurales et électroniques d'un nouveau matériau inorganique

Nour El Houda Belkafouf<sup>1</sup>, Abdelkader Chouaih<sup>2</sup>, Fodil Hamzaoui<sup>2</sup>

<sup>1</sup> doctorante – Algérie

<sup>2</sup> Professeur – Algérie

Notre travail concerne la modélisation moléculaire d'une nouvelle structure organique de formule chimique C<sub>19</sub>H<sub>14</sub>O<sub>2</sub>N<sub>2</sub>S<sub>3</sub>. Des calculs théoriques en utilisant une méthode de la chimie quantique a été effectué pour l'optimisation géométrique de la molécule à l'aide de logiciel gaussian 09. En parallèle, une résolution structurale basée sur l'analyse de diagramme de diffraction des rayons x sur poudre. Les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux de l'expérimentation. la géométrie optimisée est utilisée pour déterminer d'autre propriétés structurales électroniques : les niveaux des énergies des orbitales frontières, le moment dipolaire et le potentiel électrostatique.

# Distribution de l'eau dans le site actif de l'oncoprotéine NRas par dynamique QM/MM

Ruth Tichauer\* <sup>1</sup>, Marie Brut <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire d'analyse et d'architecture des systèmes [Toulouse] (LAAS) – Institut National Polytechnique [Toulouse], Institut National des Sciences Appliquées - Toulouse, Université Paul Sabatier - Toulouse 3, Centre National de la Recherche Scientifique : UPR8001 – 7 Av du colonel Roche 31077 TOULOUSE CEDEX 4, France

Associées à plus de 30% de toutes les tumeurs humaines, les mutations somatiques du gène RAS favorisent l'oncogenèse de certains cancers et sont des marqueurs de mauvais pronostic. Pour cette raison, la voie de signalisation RAS attire depuis 20 ans une attention considérable en tant que cible pour la thérapie anticancéreuse. Beaucoup de stratégies ont été proposées pour inhiber l'oncoprotéine Ras, mais aucun inhibiteur pharmacologique efficace n'a atteint le stade clinique. Afin de proposer de nouvelles stratégies thérapeutiques efficaces, il est essentiel d'acquérir une meilleure connaissance de la structure et de l'activité GTPase de ces protéines à l'échelle atomique. Ce travail est mené par des calculs QM/MM dynamiques, sur les formes natives et mutées sur site Q61 de Nras, cible majeur des mélanomes en particulier. Nous montrons notamment de quelle manière la distribution de l'eau est affectée par les mutations et peut être reliée à la modulation de l'hydrolyse.

---

\*Auteur correspondant: rhtichau@laas.fr

# Modélisation globale et compacte de surfaces d'énergie potentielle

Yann Cornaton<sup>1</sup>, Roberto Marquardt<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Mathématiques et Physique (LAMPS) – Université de Perpignan Via Domitia :  
EA4217 – 52, avenue Paul Alduy 66860 Perpignan cedex, France

<sup>2</sup> Institut de Chimie de Strasbourg – université de Strasbourg, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7177 – 1 rue Blaise Pascal BP 296R8 67008 STRASBOURG CEDEX, France

Les surfaces d'énergie potentielle (SEP), en chimie, sont des hypersurfaces à  $3N-6$  dimensions (où  $N$  est le nombre d'atomes dans le système étudié) décrivant l'énergie d'un système chimique en fonction de sa conformation. Leur modélisation est utilisée dans plusieurs domaines tels que le calcul des spectres vibrationnels ou les études de dynamique quantique nucléaire.

Les formules les décrivant disponibles dans la littérature consistent généralement en des expansions polynomiales à des ordres très élevés. Bien qu'elles puissent atteindre une très grande précision autour d'une géométrie d'équilibre, elles présentent très rarement un caractère global et font appel à un très grand nombre de paramètres ajustables (plusieurs centaines de paramètres pour des molécules triatomiques), ce qui rend leur exploitation compliquée.

Je présenterai ici mes travaux sur le développement de nouvelles formules compactes pour modéliser les SEP de manière globale tout en conservant une précision spectroscopique.

# Analyse des mouvements globaux dans les enzymes GST

Pierre Ghesquiere , Patrick Senet <sup>1</sup>, Patrice Delarue <sup>2</sup>, Paul Grassein <sup>2</sup>,  
Adrien Nicolai <sup>2</sup>, Fabrice Neiers <sup>3</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne (ICB) – CNRS : UMR6303 – France

<sup>2</sup> Laboratoire Interdisciplinaire Carnot de Bourgogne (ICB) – CNRS : UMR6303, Université de Bourgogne – 9 avenue Alain Savary, BP 47870, 21078 Dijon Cedex, France

<sup>3</sup> Centre des Sciences du Goût et de l'Alimentation (CSGA) – Université de Bourgogne, Institut national de la recherche agronomique (INRA) : UMR1324, CNRS : UMR6265 – Bât. CSG - 9E Bd Jeanne d'Arc - 21000 Dijon, France

Les protéines humaines Glutathion Transférase sont une classe d'enzyme en action dans les processus de détoxification cellulaire, par conjugaison d'espèces électrophiles avec un glutathion ; ce sont ainsi des candidats naturels pour le développement de nouvelles stratégies thérapeutiques. Il est supposé que l'activité de ces enzymes, composées de deux chaînes symétriques, passe par l'utilisation de quatre sites d'adsorption de ligands dont deux pour le glutathion et l'objectif de cette étude réside en particulier dans la compréhension des modes d'ouverture ou de fermeture de ces poches, caractérisant ainsi l'adsorption de différentes cibles biologiques.

Dans cette optique, la modélisation du comportement de ces protéines, à l'état naturel, ou en présence de glutathion et/ou d'un ligand, a été entreprise par des simulations de dynamique moléculaire classique, afin de pouvoir reproduire, caractériser et quantifier, les différents modes globaux à l'œuvre dans le mouvement de ces systèmes.

En premier lieu, différents critères de similarité sont calculés sur les structures obtenues, en particulier en comparant les angles internes aux deux chaînes, afin de pouvoir justifier de la convergence des différentes trajectoires et de caractériser les différentes conformations représentatives de la structure de la protéine.

Ensuite, le mouvement des ligands est étudié afin de visualiser leurs entrées et sorties dans les sites de la protéine, par le suivi de leur proximité relative et au centre des sites. Ces mouvements sont alors mis en relation avec une analyse fine des poches, et des zones de contact entre les deux chaînes en vue de saisir leur interdépendance. Les différents comportements des ligands sont donc interprétés en vue de leur structure chimique, afin d'apporter un potentiel prédictif à ce modèle.

Enfin, une analyse des composantes principales du mouvement est effectuée sur les coordonnées internes de la protéine et couplée avec une analyse de ses modes normaux de vibration à basse fréquence. Ces deux techniques d'analyse permettent alors de localiser les zones de forte mobilité de l'enzyme et donc celles responsables de l'ouverture de ses sites d'adsorption.

# Theoretical Study of Unidirectional Exciton Transfer in Phenylene-Ethynylene Dendrimers

Emmeline Ho\*<sup>1</sup>, Marie-Liesse Doublet<sup>2,3</sup>, Benjamin Lasorne†<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Charles Gerhardt - Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux de Montpellier (ICG ICMMM) – CNRS : UMR5253, Université Montpellier II - Sciences et techniques, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier – Bâtiment 15 - CC1501 Place Eugène Bataillon - 34095 Montpellier cedex 5, France

<sup>2</sup> Institut Charles Gerhardt – CNRS – Université Montpellier II, France

<sup>3</sup> Réseau sur le stockage électrochimique de l'énergie (RS2E) – CNRS : FR3459 – France

Hydrocarbon dendrimers are macromolecules experimentally well-known for their interesting optoelectronic properties[1]. Phenylene-ethynylene (PE) dendrimers behave as light-harvesting antennae where unidirectional exciton transfer occurs along a series of linear, conjugated fragments connected via meta-junctions on phenylene rings. Thus, PE dendrimers have received much interest as artificial photosynthetic systems. Recent theoretical investigations based on semiclassical dynamics simulations[2] have indicated that the unidirectional energy transfer involves a cascade of conical intersections and is mediated by a sequential transfer of vibrational excitation involving a collective acetylene-bond stretching within each linear fragment.

We investigated the electronic structure of a series of PE chains with various meta-substitution patterns among linear fragments of different lengths. TD-DFT calculations showed that the electronic states involved in the energy transfer are almost pure single excitations localised on linear fragments, which allows a first-order description in terms of near-frontier  $\pi$ -orbitals. Calculations based on the extended Hückel approach confirmed that the highly-conjugated linear fragments bear some similarity with polyene chains when the number of units increases. In contrast, meta-substitution almost breaks this conjugation, resulting in orbitals that tend to localise on the linear fragments. In addition, we rationalised how the propagation of vibrational excitation through acetylene bonds is directly related to the redistribution of electron density that characterises the exciton transfer. This work is the basis for the production of semi-empirical-type models to be used ultimately in quantum dynamics simulations of such energy transfer processes.

1. S.F. Swallen, R. Kopelman, J.S. Moore, and C. Devadoss, *Journal of Molecular Structure* 485–486 (1999) 585–597.
2. S. Fernandez-Alberti, V. D. Kleiman, S. Tretiak, and A. E. Roitberg, *J. Phys. Chem. A* 113 (2009) 7535–7542.

---

\*Auteur correspondant: emmeline.ho@umontpellier.fr

†Auteur correspondant: benjamin.lasorne@univ-montp2.fr

# Ultrafast Heme-CO dissociation triggered by strong vibronic couplings

Miquel Huix-Rotllant <sup>1</sup>

<sup>1</sup> CNRS - Université Aix-Marseille – Université Aix-Marseille – Aix-Marseille Université – CNRS , ICR  
UMR7273 Avenue Escadrille Normandie-Niemen, 13013 Marseille, France

Globular hemeproteins play a central role in living organisms as transport of gaseous diatomic molecules in red blood cells. The prosthetic group contains a heme with a ferrous metal center, which binds on one side to the protein and on the other side to a diatomic molecule (CO, NO, O<sub>2</sub>,...). An ultrafast dissociation of the Fe-gas molecular bond occurs upon excitation of the porphyrin chromophore. The details of this photochemical reaction (discovered a century ago) are still elusive. During the photolysis, the iron center undergoes a spin transition from a singlet to a quintet state typical of iron spin-crossover complexes. Recent experiments have shown that this could occur in less than 100 fs thanks to strong vibronic couplings. In this talk, I will present a model Hamiltonian and the resulting dynamics for a prototypical His-Heme-CO complex that represents the spin-crossover process and the photolysis upon excitation to the lowest porphyrin band. The model contains 12 vibrations that include the most important vibronic effects as well as a dissociation coordinate. The electronic states consist of a manifold of 19 singlet states, 20 triplet states and 20 quintet states, as well as the vibronic couplings within each manifold and the spin-orbit couplings between the different manifolds. The results show that the wavepacket moves away from the Franck-Condon region very rapidly, in a region where strong spin-orbit couplings allow the spin-crossover transition to occur very efficiently.

# AGAPES - an efficient potential energy surface generation method using valence coordinates

Falk Richter<sup>1</sup>, Philippe Carbonnière<sup>1</sup>, David Lauvergnat<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ECP-IPREM, Technopole Hélioparc, 2 avenue du Président Pierre Angot - 64053 Pau – Université de Pau et des Pays de l'Adour - UPPA (FRANCE) – France

<sup>2</sup> Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-Sud and CNRS, UMR 8000, 91405 Orsay, France – LCP – France

A method is presented designed for the generation of potential energy surfaces (PES's) of large rigid and semi-rigid polyatomic molecules in valence coordinates suited for vibrational calculations up to mid-infrared energy range. AGAPES(1) is an adaptive approach guided by information from intermediate vibrational calculations - using internal valence kinetic energy operators (KEOs) generated by the TANA(2) program suite- successively improving a cut-HDMR expansion. Examining the test cases but-enal and the semirigid but-dienol, the performance of AGAPES is discussed along with the possibility of achieving near linear scaling of sample points with the molecule by exploiting the found locality of the PES (3) coupling in valence coordinates. Finally, we combine AGAPES and TANA to obtain highly accurate vibrational levels for the case of Formamide (4). (1) F. Richter, P. Carbonniere, A. Dargelos, C. Pouchan, *J. Chem. Phys.* 2012,136, 224105. (2) M. Ndong, A. Nauts, L. J.-Doriol, H.-D. Meyer, F. Gatti, D. Lauvergnat. *J. Chem. Phys.* 2013, 139, 204107. (3) Richter, F., Carbonniere, P., Pouchan. *C. Int. J. Quantum Chem.* 2014, 114, 1401?1411. (4) F. Richter, F. Thauay, D. Lauvergnat, P. Carbonnière. *J. Phys. Chem. A*, 2015, 119 (48), pp 11719?11728

# Effect of a dc bias field on the nonlinear complex susceptibility and dynamic magnetic hysteresis of antiferromagnetic nanoparticles

Bachir Ouari <sup>1</sup>

<sup>1</sup> ouari – 1University of Tlemcen, Physics department, BP 119 Chetouane, Tlemcen, Algeria, Algérie

The magnetic dynamic hysteresis (DMH) of antiferromagnetic nanoparticles in superimposed ac and dc magnetic fields of arbitrary amplitude is considered using Brown's continuous diffusion model. [1,2] The nonlinear complex susceptibility and DMH loops of an individual antiferromagnetic nanoparticle are evaluated and compared with the linear regime for extensive ranges of the anisotropy, the ac and dc magnetic fields, damping, and the specific antiferromagnetic parameter. It is shown that the shape and area of the DMH loops of antiferromagnetic particles is substantially altered by applying a dc field that permits tuning of the specific magnetic power loss in the nanoparticles [3].



# Liste des participants

- Beattie Nicholas
- Belkafouf Nour El Houda
- Blaise Paul
- Bossion Duncan
- Brut Marie
- Carbonniere Philippe
- Ceausu-Velcescu Adina
- Connétable Damien
- Coppens François
- Cornaton Yann
- Crespos Cedric
- David Matthieu
- Dejardin Pierre-Michel
- Etienne Thibaud
- Filhol Jean-Sébastien
- Gadéa Florent Xavier
- Ghesquiere Pierre
- Gonon Benjamin
- Halberstadt Nadine
- Hemeryck Anne
- Ho Emmeline
- Huix-Rotllant Miquel
- Ibarguen Becerr Cesar
- Lara Moreno Miguel Del Jesus
- Larregaray Pascal
- Lasorne Benjamin
- Lemoine Didier
- Lepetit Bruno
- Lognon Elise
- Maxime Martinez
- Ouari Bachir
- Pena Torres Alejandro
- Petuya Rémi
- Pitié Sylvain
- Raynaud Christophe
- Richter Falk
- Scribano Yohann
- Shehu Kaltrina
- Talbi Dahbia
- Tonnelé Claire
- Vindel Zandbergen Patricia
- Worth Graham



# Liste des sponsors



Université de Montpellier



Pôle Chimie Balard



FONDATION  
Balard

Fondation Balard



Ecole Nationale Supérieure de Chimie  
de Montpellier

LabEx  
CheMISyst

LabEx CheMISyst



Institut Carnot Chimie Balard  
CIRIMAT



ED Antoine Balard

Ecole Doctorale Sciences Chimiques  
Balard



Réseau Français de Chimie Théorique



Société Chimique de France  
Languedoc-Roussillon

Société Chimique de France, section  
Languedoc-Roussillon