



## « PHYSICO-CHIMIE DES EXCITATIONS ÉLECTRONIQUES ET VIBRATIONNELLES : DIALOGUE THÉORIE-EXPÉRIENCE »

9 h 00 : Accueil

9 h 15 - 12 h 30 : Excitation électronique

> 9 h 15 - 9 h 40 : « Etats électroniques excités : problèmes et questions des expérimentateurs pour les théoriciens » par Thomas Gustavsson (LFP),

> 9 h 40 - 10 h 05 : « Présentation et performance des méthodes théoriques » par Rodolphe Pollet (SIS2M),

> 10 h 05 - 10 h 30 : « Intersections coniques » par Michèle Desouter-Lecomte (LCP),

> 10 h 30 - 10 h 50 : *pause café*

> 10 h 50 - 11 h 15 : « Aspects multi-échelles des transferts d'électrons » par Aurélien de la Lande (LCP),

> 11 h 15 - 12 h 30 : **Table Ronde**

**Animateurs** : Isabelle Demachy (LCP), Fabienne Mérola (LCP), Pascale Changenet-Barret (LFP)

**Intervenants** : Gilles Frison (DCMR), Isabelle Compagnon (LASIM), Lionel Poisson (LFP)

> 12 h 30 - 14 h 00 : *Déjeuner - buffet*

14 h 00 - 17 h 30 : Excitation vibrationnelle

> 14 h 00 - 14 h 25 : « Spectroscopie vibrationnelle : problèmes et questions des expérimentateurs pour les théoriciens » par Anne Zehnacker (ISMO),

> 14 h 25 - 14 h 50 : « Spectroscopie infrarouge statique et résolue dans le temps pour l'étude de la liaison hydrogène » par Sophie Le Caër (SIS2M),

> 14 h 50 - 15 h 15 : « Modélisation de spectres d'action » par Pascal Parneix (ISMO),

> 15 h 15 - 15 h 40 : « Champs de force: exploration de l'espace conformationnel et spectroscopie IR » par Carine Clavaguera (DCMR),

> 15 h 40 - 16 h 00 : *pause café*

> 16 h 00 - 16 h 25 : « Simulations de spectres IR par DFT-MD » par Marie-Pierre Gageot (LAMBE),

> 16 h 25 - 17 h 45 : **Table ronde**

**Animateurs** : Jean-Yves Salpin (LAMBE), Debora Scuderi (LCP)

**Intervenants** : Pascale Roy (ligne AILES, SOLEIL), Rodolphe Vuilleumier (ENS Paris), Eric Gloaguen (LFP), Guilhem Gallot (LOB, Ecole Polytechnique)

**CONTACTS** : Carine CLAVAGUERA, [carine.clavaguera@polytechnique.edu](mailto:carine.clavaguera@polytechnique.edu)

Aurélien DE LA LANDE, [aurelien.de-la-lande@u-psud.fr](mailto:aurelien.de-la-lande@u-psud.fr)

Inscriptions : <http://www.cpps.u-psud.fr/wiki>