

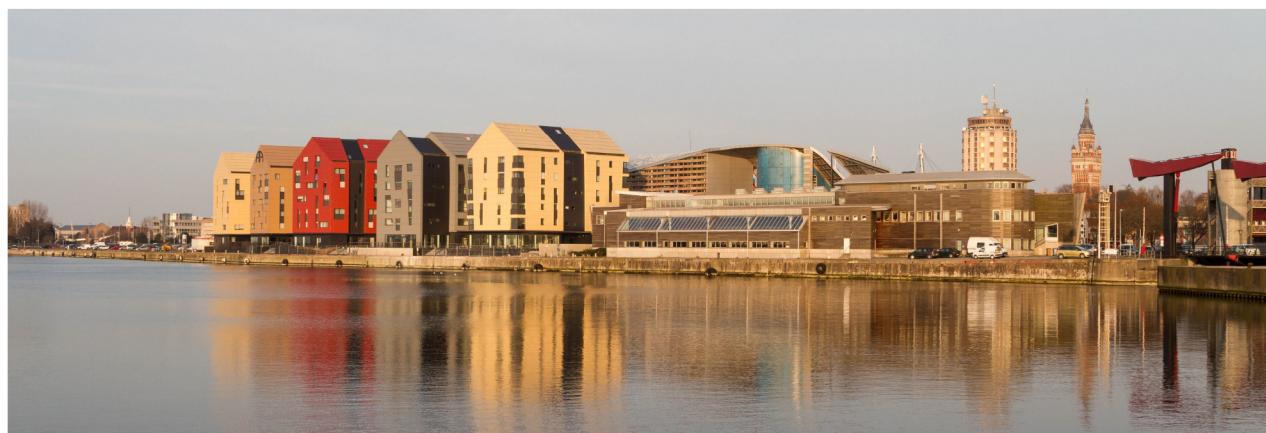
cnrs

CDR

Groupement
de recherche
EMIE Edifices Moléculaires Isolés
et Environnés

Journées Plénières 2022

Programme



Dunkerque
14 - 17 Juin 2022

lPCA
Laboratoire de Physico-Chimie
de l'Atmosphère UR 4493



MUTATIONS TECHNOLOGIQUES ET ENVIRONNEMENTALES
Pôle MTE

CaPPA
Labex

Dunkerque Grand Littoral
COMMUNAUTE URBaine

SP
Société Française
de Physique

PALM
Laboratoire d'Excellence
Physique Atomes Lumière Matière

ULCO
Université
Littoral Côte d'Opale

Région
Hauts-de-France

Université
de Lille

Comité scientifique du GDR EMIE

- **Pierre Carcabal, ISMO, Université Paris-Saclay / CNRS**
- Arnaud Cuisset, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Stéphane Coussan, PIIM, Aix-Marseille Université / CNRS
- Cyril Falvo, ISMO, Université Paris-Saclay / CNRS
- Robert Georges, IPR, Université Rennes1 / CNRS
- Adèle Laurent, CEISAM, Université de Nantes / CNRS
- Luke Mac Aleese, ILM, Université Lyon1 / CNRS
- Joelle Mascetti, ISM, Université de Bordeaux / CNRS
- Thomas Pino, ISMO, Université Paris-Saclay / CNRS
- Lionel Poisson, ISMO, Université Paris-Saclay / CNRS
- Claire Romanzin, ICP, Université Paris-Saclay / CNRS
- Michael Rey, GSMA, Université Champagne-Ardennes / CNRS
- Patrick Rousseau, CIMAP, Université Caen Normandie / CNRS
- Aude Simon, LCPQ, Université Toulouse III / CNRS
- Sophie Sobanska, ISM, Université de Bordeaux / CNRS
- Olivier Sublemonier, NIMBE, CEA/Saclay
- Céline Toubin, PhLAM, Université de Lille / CNRS
- Ha Tran, LMD, Sorbonne Université / CNRS
- Sébastien Zamith, LCAR, Université Toulouse III / CNRS

Comité local d'organisation

- **Arnaud Cuisset, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale**
- Guillaume Dhont, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Éric Fertein, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Marc Fourmentin, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Pierre Kulinski, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Anthony Roucou, LPCA, Université Littoral Côte d'Opale
- Véronique Vanvincq, Pôle MTE, Université Littoral Côte d'Opale
- **Céline Toubin, PhLAM, Université de Lille**
- Manuel Goubet, PhLAM, Université de Lille
- Alejandro Rivero-Santamaria, PhLAM, Université de Lille

mardi 14 juin 2022

HEURES	ÉVÉNEMENT
09:00 - 10:15	accueil des participants/caf� de bienvenue - accueil des participants/caf� de bienvenue
10:15 - 10:30	Mot de bienvenue - comit�
10:30 - 12:10	Session 1 - Micha�l Rey <ul style="list-style-type: none">› Probing the influence of the coordination of uranyl in its luminescence properties from relativistic quantum chemical methods and laser fluorescence spectroscopy - Val�rie Vallet, Laboratoire PhLAM, UMR 8523
11:10 - 11:30	<ul style="list-style-type: none">› Spectroscopic study of intermolecular interactions between mannose and receptor models - Ander Camiruaga, Institut des Sciences Mol�culaires d'Orsay
11:30 - 11:50	<ul style="list-style-type: none">› Activit�s de spectroscopie TeraHertz large-bande de gaz et d'a�rosols au laboratoire IEMN en collaboration avec le PC2A, le LOA et le LPCA - Sophie Eliet, IEMN
11:50 - 12:10	<ul style="list-style-type: none">› Laser-Induced Breakdown Spectroscopy for atmospheric monitoring of selected fine and ultrafine particles - Olivier Sublemontier, Atomic and Alternative Energy Commission
12:10 - 14:00	D�jeuner
14:00 - 15:40	Session 2 - Guillaume Dhont <ul style="list-style-type: none">› High resolution rotational spectroscopy of large amplitude motions and molecular structures - Ha Vinh Lam Nguyen, Universit� Paris-Est Cr�teil Val-de-Marne - Paris 12
14:40 - 15:00	<ul style="list-style-type: none">› Understanding the atmosphere of hot Jupiter exoplanets: high resolution spectroscopy of ethylene in the 1.6 µm spectral region - Sol�ne Perot, Institut de Physique de Rennes - Universit� de Rennes 1
15:00 - 15:20	<ul style="list-style-type: none">› Host-guest complexes between cyclodextrins and small drugs for SERS detection in drinking water - Nicolas Nieuwjaer, Laboratoire de Physique des Lasers
15:20 - 15:40	<ul style="list-style-type: none">› Calcul de l'absorption inuite par collision de CH4+CO2 dans l'infrarouge lointain - Wissam Fakhardji, Laboratoire de M�t�orologie Dynamique (UMR 8539)
15:40 - 16:10	Pause caf�
16:10 - 17:50	Session 3 - S�bastien Zamith <ul style="list-style-type: none">› Collisions r�actives entre ions et mol�cules � basse temp�rature : apports des �coulements supersoniques uniformes. - Ludovic Biennier - Univ Rennes, CNRS, IPR (Institut de Physique de Rennes) – UMR 6251, F-35000 Rennes, France› New (TD-)DFT-based methodology for describing the electron attachment - Franck Rabilloud - Universit� Lyon 1 - Institut Lumière Mat�re› Rotational study of atmospheric volatile organic compounds using the new CP-FTMW spectrometer of Lille - ELIAS NEEMAN - Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Mol�cules - UMR 8523› Methyl iodide with the perturbers of atmospheric interest: line-broadening coefficients and their temperature dependence - Larisa Troitsyna - Groupe de spectrom�trie mol�culaire et atmosph�rique
17:55 - 20:00	Poster / Cocktail

mercredi 15 juin 2022

HEURES	ÉVÉNEMENT
09:00 - 10:40	Session 4 - Val�rie Brenner <ul style="list-style-type: none">› Analyse conformationnelle par spectroscopie laser UV : l'apport d�cisif de l'�tude th�orique des effets Stark induits par l'environnement du chromophore - ERIC GLOAGUEN, Laboratoire Interactions Dynamiques et Lasers
09:40 - 10:00	<ul style="list-style-type: none">› Novel methodology for systematically constructing global effective ab initio-based models: towards a change of paradigm in high-resolution molecular spectra analysis? - Michael Rey, Groupe de spectrom�trie mol�culaire et atmosph�rique
10:00 - 10:20	<ul style="list-style-type: none">› Development of photoacoustic sensor for the measurement of peroxy radicals and ozone production in the atmosphere - Goufrane ABICHOU, Goufrane ABICHOU

HEURES	ÉVÉNEMENT
10:20 - 10:40	› The hydration of polycyclic aromatic compounds: the case of naphthaldehyde - <i>Jordan Claus - Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules - UMR 8523</i>
10:40 - 11:10	Pause café
11:10 - 12:30	Session 5 - Wutharath Chin
11:10 - 11:50	› Spectroscopy of sugars. Physical chemistry answers to analytical chemistry questions - <i>isabelle compagnon - Institut Lumière Matière</i>
11:50 - 12:10	› Extracting vibrational anharmonicities from short driven molecular dynamics trajectories - <i>Loïse Attal - Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay</i>
12:10 - 12:30	› PIRENEA and PIRENEA 2: studying photon-PAHs interactions in relevant astrophysical conditions - <i>Alexandre Marciniak - Laboratoire Collisions Agrégats Réactivité</i>
12:30 - 14:00	Déjeuner
14:00 - 15:20	Session 6 - Aude Simon
14:00 - 14:40	› Construction, Destruction and High-resolution Spectroscopic Characterization of Fragile Molecular Edifices - <i>Clément Lauzin, Université Catholique de Louvain</i>
14:40 - 15:00	› Photo-isomérisation sélective de l'acide salicylique - <i>Julien Berthomier, ISMO</i>
15:00 - 15:20	› Water-corannulene clusters embedded in a rare gas matrix: structures, energetics and IR spectra - <i>Héloïse Leboucher, Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPQ)</i>
15:20 - 15:50	Pause café
15:50 - 17:30	Session 7 - Ha Tran
15:50 - 16:30	› Some unusual aspects of the absorption spectroscopy of the first greenhouse gas - <i>Alain Campargue - LiPHY</i>
16:30 - 16:50	› Laser moléculaire à NH3 pour la spectroscopie hétérodyne THz - <i>Marie-Hélène Mammez - Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère</i>
16:50 - 17:10	› Interactions of atmospheric pollutants with water: 4-methyl-2-nitrophenol and its water complex studied by microwave spectroscopy and quantum chemistry - <i>Eléonore Antonelli - Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques</i>
17:10 - 17:30	› Microwave Spectra Of Dinitrotoluene Isomers: A New Step Towards The Detection Of Explosive Vapors - <i>Mhamad Chrayteh - Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère, Pascal DREAN - Physique des Lasers Atomes et Molécules, PhLAM, UMR8523, Université de Lille, CNRS, F-59000 Lille, France, Manuel Goubet - Physique des Lasers Atomes et Molécules, PhLAM, UMR8523, Université de Lille, CNRS, F-59000 Lille, France, Anthony Roucou - Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère, Arnaud Cuisset - Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère</i>
18:15 - 19:00	Transfert vers et visite du PLUS - Transfert vers et visite du PLUS
19:00 - 20:00	Conférence grand public - Arnaud Cuisset
19:00 - 20:00	› L'odyssée d'une bulle de champagne - <i>Gérard Liger-Belair</i>

jeudi 16 juin 2022

HEURES	ÉVÉNEMENT
09:00 - 10:40	Session 8 - Marc Briant
09:00 - 09:40	› Multiscale modelling approaches for the protein-solid interface - <i>Sophie Sacquin-Mora, CNRS, Laboratoire Biochimie Théorique CNRS UPR9080</i>
09:40 - 10:00	› Mapping the electronic transitions of protonation sites in peptides using NEXAMS - <i>Juliette Leroux, Centre de recherche sur les Ions, les MATériaux et la Photonique, Zernike Institute for Advanced Materials, University of Groningen, Groningen, Deutsches Elektronen-Synchrotron [Hamburg]</i>
10:00 - 10:20	› QUANTUM CHEMICAL INVESTIGATION OF INTRAMOLECULAR HYDROGEN BONDS IN OXYGENATED AROMATIC MOLECULES: INFLUENCE OF RING SIZE, DONOR/ACCEPTOR GROUPS AND SUBSTITUTANTS - <i>Jonas Bruckhuisen, Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère</i>
10:20 - 10:40	› UV spectroscopy of highly aliphatic naphthalene derivatives and perspectives as new carrier for the interstellar bump - <i>Joffrey Fréreux - Institut de la matière condensée et des nanosciences / Institute of Condensed Matter and Nanosciences</i>

HEURES	ÉVÉNEMENT
10:40 - 11:10	Pause café
11:10 - 12:30	Session 9 - Manuel Goubet
11:10 - 11:50	› Mesure expérimentales des effets électroniques de ligands dans les complexes organométalliques - <i>Héloïse Dossmann - Institut Parisien de Chimie Moléculaire</i>
11:50 - 12:10	› Modelling prebiotic molecules trapped in interstellar ice. New DFTB/MM (QM/MM) Hybrid Method and Real Time – TD-DFTB in deMonNano : implementation and first applications. - <i>Maysa YUSEF BUEY - Laboratoire de Chimie et Physique Quantique (LCPQ)</i>
12:10 - 12:30	› Microwave Spectroscopic and Quantum Chemical Investigations of 2,5-Dimethylfluorobenzene - <i>Haoyue Sun - Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques, Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques</i>
12:30 - 14:00	Déjeuner
14:00 - 15:30	Table ronde : retour sur le tour de France de la spectroscopie - Table ronde : retour sur le tour de France de la spectro
15:30 - 16:00	Pause café
16:00 - 17:30	Table ronde : actions du GDR à venir - Table ronde : actions du GDR à venir
19:00 - 23:00	Banquet

vendredi 17 juin 2022

HEURES	ÉVÉNEMENT
09:00 - 10:20	Session 10 - Céline Toubin
09:00 - 09:40	› Gas hydrates: naturally occurring water-gas assemblies - <i>Arnaud Desmedt, Groupe Spectroscopie Moléculaire - Institut des Sciences Moléculaires</i>
09:40 - 10:00	› Molecular dynamics investigation of the influence of surfactants on halogens propensity at the air-water interface - <i>Rawan AbouHaidar, Laboratoire de Physique des Lasers, Atomes et Molécules - UMR 8523</i>
10:00 - 10:20	› Measuring the difference in collisional excitation of He with HCN and HNC through low temperature pressure broadening measurements - <i>Brian Hays, Université Catholique de Louvain, Univ Rennes, CNRS, IPR (Institut de Physique de Rennes) - UMR 6251, F-35000 Rennes</i>
10:20 - 10:50	Pause café
10:50 - 12:10	Session 11 - Pierre Carçabal
10:50 - 11:30	› High-resolution terahertz spectroscopy of atmospheric compounds - <i>Anthony Roucou - Laboratoire de Physico-Chimie de l'Atmosphère</i>
11:30 - 11:50	› JET-COOLED MID-INFRARED LASER SPECTROSCOPY OF CENTROSYMMETRIC TWO-RING PAHS - <i>Sathapana CHAWANANON, MONARIS</i>
11:50 - 12:10	› Etude de la vanilline protonée/déprotonée en phase gazeuse - <i>Alejandro Gutiérrez-Quintanilla, Physique des interactions ioniques et moléculaires</i>
12:10 - 12:30	Clôture des journées - comité
12:30 - 14:00	Panier repas

Liste des posters

1. Measurements of Line Intensities and self-broadening coefficients in the ν_2 , ν_5 and $\nu_3 + \nu_6$ Bands of Methyl Iodide, *Ben Fathallah Ons*.
2. Utilization of a THz ultra-sensitive spectrometer for trace gas detection, *Elmaleh Coralie*.
3. Is neutral C₆₀ molecule a carrier of the diffuse interstellar bands?, *Lecomte Julien*.
4. Intensités et coefficients d'élargissement par la pression de raies de CH₃Br observées dans le domaine THz, *Tchana Betnga Wilfried*.
5. Molecules probed with a slow chirped-pulse excitation: analytical model of the free-induction-decay signal, *Dhont Guillaume*.
6. Kinetics and thermodynamics insights in conformational relaxation from trap and release tandem-IMS measurements, *Le Fèvre Aurélien*.
7. Millimeter-wave Fabry-Perot resonator for the detection of semi-volatile organic vapors, *Simon Fabien*.
8. Collision induced dissociation of mixed water pyrene clusters, *M Nair Arya*.
9. Complex refractive index determination of PTFE, TPX and polypropylene windows for TeraHertz broadband spectroscopy, *Bichon Jeyan*.
10. Toward ab initio model potential for rare gas atoms and closed-shell molecules, *Hochard Erwan*.
11. High resolution rovibrational spectroscopy of jet-cooled PAH nitrogen derivatives, *Asselin Pierre*.
12. Broadband quartz enhanced infrared photodetector for tunable diode laser spectroscopy, *Wei Tingting*.
13. Tropospheric Reactivity with NO₃ Radicals of Biomass Burning Emitted Compounds, the Methylated-Furans: Rate coefficients and Mechanistic Pathways in the Gas- and Aerosol Phases, *Al Ali Fatima*.
14. Multipass enhanced QEPAS (quartz-enhanced photoacoustic spectroscopy), *Cui Ruyue*.
15. Optical monitoring OH radicals using Faraday rotation measurement enhanced by Off-axis integrated cavity output spectroscopy at 2.8 um, *Ngo Nhut*.
16. Rotational spectroscopy of reactive species for interstellar discovery, *Hearne Thomas S.*
17. Theoretical studies of photodesorption of molecular interstellar ices, *Del Fré Samuel*.

18. Spectroscopie IRMPD et calculs de chimie quantique de complexes ioniques or-phosphine ou or-thiol, *Desfrançois Charles*.
19. MULTICARME: a modified Chernin-type multi-pass cell designed for IR and THz long-path absorption measurements in the CHARME atmospheric simulation chamber, *Fertein Eric*.
20. Spectroscopie du 4(5)-Méthylimidazole et de ses hydrates, hébergés dans des gouttelettes d'hélium, *Briant Marc*.
21. A system bath approach for the quantum vibrational dynamics of large molecules, *Attal Loïse*.
22. Analyse structurale des épitopes d'immunoglobuline G par MS-IR, *Infantino Alicia*.
23. Synthèse de complexes organométalliques d'or(I) et d'or(III) et détermination de leur énergie de dissociation par spectrométrie de Masse, *Soep Clément*.
24. TeraWaste : In-situ/real time TeraHertz analysis of gaseous emission in the Dunkirk Urban Community's waste incineration/power plant, *Decker Jean*.
25. High-resolution spectroscopy and analysis of combination bands of SiF₄, *Merkulova Mariia*.
26. Rotation de molécules méthylées en matrice de para-hydrogène : analyse par conversion de spin nucléaire, *Lorin Florian*.
27. Quantum and spectroscopic analysis in the microwave domain of cyanopropene, *Nguyen Truong Anh*.
28. Évaporation de molécules neutres en fluide supercritique pour une caractérisation structurale par spectroscopie laser résolue en conformation, *Baraud Jean-Xavier*.
29. Characterization of irradiated sulfur-containing cyclic dipeptides by mass spectrometry and IRMPD spectroscopy, *Yining Jiang*.
30. Transférabilité de la DFTB, *Guibourg Paul*.
31. Developement of an Intracavity Quartz Enhanced Photoacoustic Spectroscopy (I-QEPAS) system, *Nguyen-Ba Tong*.
32. Investigation of ligand electronic effects on iron cyclopentadienyl complexes using photo-electron spectroscopy, *Bourehil Lyna*.
33. Vers un spectromètre 2D-IR à haute résolution, *Jouan Armel*.
34. Instrumentation for High resolution THz Spectroscopy, *Khabbaz Alexandra*.
35. Theoretical study of butadiene clusters, *Douady Julie*.
36. Keto-gem diol equilibrium reaction from first principle molecular dynamics, *Chin Wutharath*.
37. Chemistry and spectroscopy of CH₃C(O)O₂ radicals, *Fittschen Christa*.
38. Photo-catalysis for the environment, sustainable energy and CO₂ recycling, *Tsirkou Aikaterini*.
39. Millimeter-wave spectroscopy of 3-methylcatechol, *Roca Manuel*.

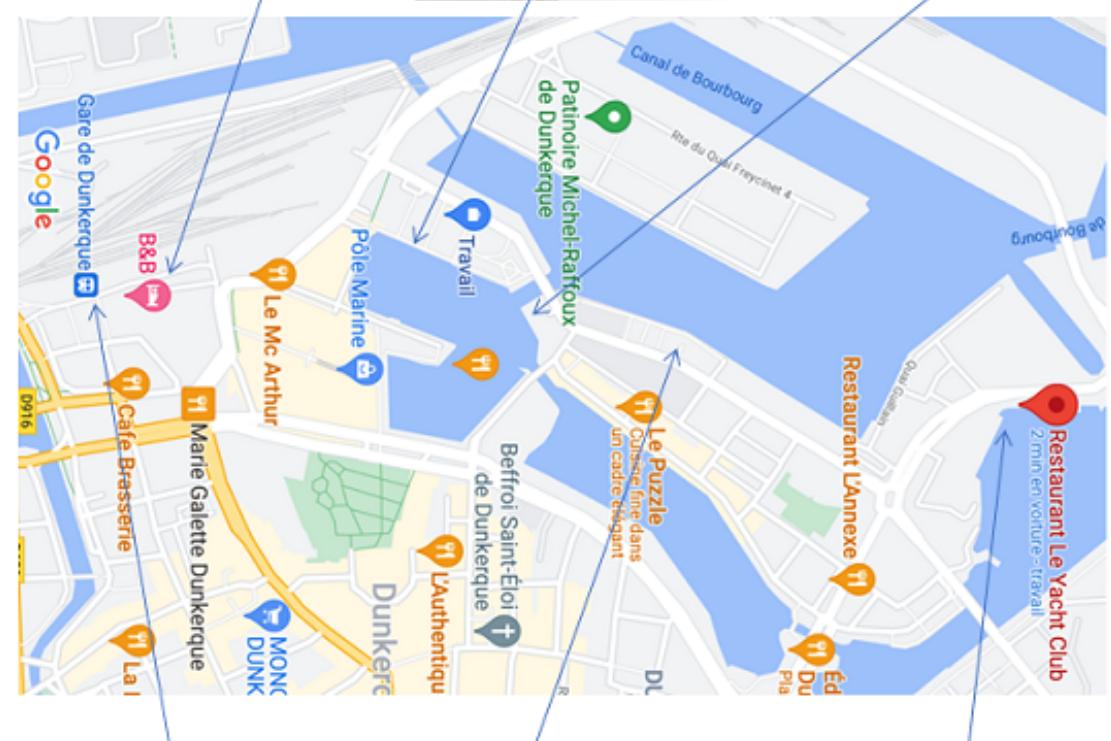
Repas du midi



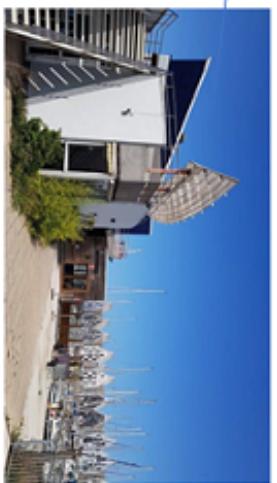
Conférences + session poster



B & B hôtel



Repas de gala
« Yacht Club »



Appart Hôtels



Gare de Dunkerque

