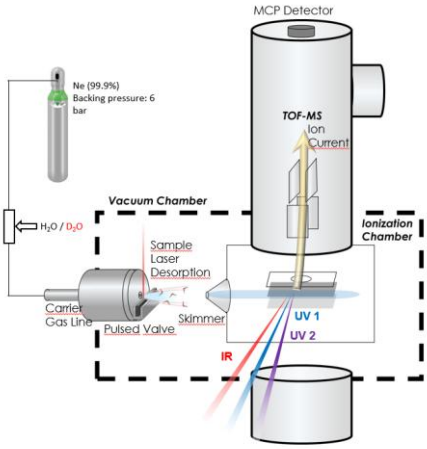
TOULOUSE LCAR/LCPQ

Arrivée depuis Marseille le mardi en fin d'après-midi. Les 5 demi-journées sur Toulouse seront réparties entre activités expérimentales et théoriques (voir ci-dessous).
Les repas de midi ainsi qu'un repas le soir seront pris en charge par le laboratoire (ainsi que toutes les nuitées dans la mesure du possible).
Départ le vendredi en début d'après-midi.

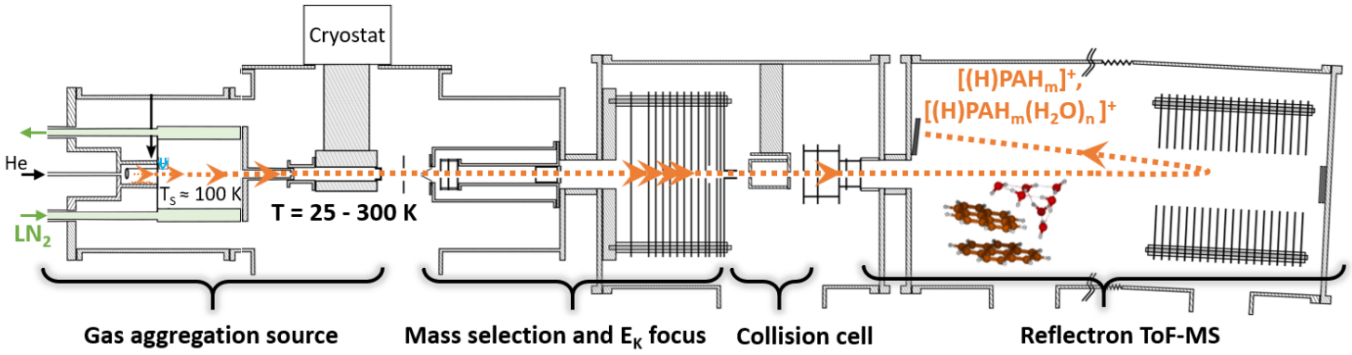
Dispositif Carlotta (LCAR – P. Çarçabal et M. Büchner)

Expérience proposée : Evaporation laser de biomolécules, complexes hydratés, jet supersonique, spectrométrie de masse, spectroscopie laser à double résonance IR-UV.



Dispositif Agrégats (LCAR – S. Zamith et A. Marciniak)

Production et thermalisation d'agrégats moléculaires mixtes eau-hydrocarbures polycycliques aromatiques. Etudes de la dissociation induite par collision et du collage par collision de ces systèmes par spectrométrie de masse.



Modélisation d'agrégats : dynamique moléculaire / DFTB et DNNP (LCPQ – M. Rapacioli, J. Cuny, A. Simon)

Nous simulerons des agrégats moléculaires de grande taille avec des approches de dynamique moléculaire dans l'état électronique fondamental. La structure électronique sera décrite avec une méthode plus efficace que les méthodes DFT standard, l'approche DFTB. Nous verrons quelles propriétés - structurale, énergétique, thermodynamique, spectroscopique - il est possible d'extraire de ces simulations et quelle est la précision attendue. Nous utiliserons éventuellement l'exploration des surfaces de potentiel en DFTB pour optimiser des potentiels de réseaux neuronaux, avec pour objectif d'augmenter la taille des systèmes étudiés, les temps de simulations et la précision des calculs.