

Prix des divisions 2006

Chimie Physique

• Prix de la division
Marc Robert

Professeur à l'Université Paris 7 Denis Diderot, Marc Robert est responsable de l'équipe « Transferts d'électron-Réactivité chimique fondamentale » au sein du Laboratoire d'électrochimie moléculaire (UMR CNRS 7591).

Ses activités de recherche concernent l'apport de l'électrochimie à la compréhension de la réactivité déclenchée par des transferts d'électron. Les champs couverts vont de la chimie organique à la chimie enzymatique, des petites molécules jusqu'aux enzymes redox et aux systèmes biologiques complexes. L'une des questions clés à laquelle ses travaux ont contribué est la compréhension à un niveau moléculaire de la façon dont les électrons cassent les liaisons et à leur modélisation avec des expressions analytiques facilement évaluables et exportables, par leur généralité, à une multitude d'autres situations expérimentales. Un autre domaine concerne l'étude du couplage transfert d'électron/transfert de proton, une association commune dans la nature et le métabolisme. Les approches électrochimiques développées actuellement par l'équipe de Marc Robert ont pour but, en combinant théorie et expérience, de contribuer à la résolution des aspects fondamentaux et biologiques du problème.

• Prix de thèse
Aurélie Perrier et Jalal Ghilane

- Ingénieur chimiste de l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP), **Aurélie Perrier** a effectué sa thèse au Laboratoire de physico-chimie moléculaire (Université Bordeaux 1) sous la direction de Jean-Claude Rayez et Laurent Bonnet. Au cours de sa thèse, intitulée

« Approche statistico-dynamique des réactions de désorption moléculaire », elle a utilisé à la fois les calculs de dynamique classique et les approches statistiques pour reproduire et comprendre les distributions d'états de molécules diatomiques ayant désorbé d'une surface métallique. Ses travaux ont montré que les réactions de désorption gouvernées par un état de transition retardé, telles que $H_2/Pt(111)$, sont correctement décrites par la théorie de l'état de transition (TET). A l'inverse, pour des réactions à barrière avancée telles que $H_2/Cu(111)$, la TET seule ne parvient pas à reproduire les distributions d'états observées expérimentalement. Il est nécessaire d'y adjoindre une modélisation dynamique *ad hoc*, traduisant de façon générale les transferts d'énergie entre l'état de transition et les produits. L'application des méthodes statistiques à ces deux types de processus a conduit à des distributions d'états en très bon accord à la fois avec les calculs de dynamique classique et avec les résultats expérimentaux. Par ailleurs, les méthodes statistiques modifiées développées présentent un caractère prédictif et une adaptabilité très supérieurs aux méthodes primitives. Les résultats obtenus par ces méthodes sont très prometteurs et ouvrent une nouvelle voie quant aux possibilités d'application des théories statistiques aux réactions de type « gaz-surface ».

Ce travail a déjà donné lieu à quatre publications dans des journaux internationaux (*Surf. Sci.*, *J. Phys. Chem. A*, *J. Chem. Phys.*, *Chem. Phys. Lett.*). Aurélie Perrier poursuit actuellement des recherches dans le domaine des calculs théoriques mixtes « mécanique quantique/mécanique moléculaire » (QM/MM) dans le groupe du professeur Massimo Olivucci (Université de Sienna, Italie).

- Après un DEA d'électrochimie (Université Paris 7) et un stage de DEA à l'ESPCI dans l'équipe de Catherine Combélas et Frédéric Kanoufi sur la réduction localisée de polymères fluorés, **Jalal Ghilane** a effectué sa thèse à l'Université de Rennes dans l'équipe de Philippe Hapiot, sur « la modification cathodique du platine et le suivi *in situ* de cette modification par microscopie à champ proche ». Dans un premier temps, le comportement cathodique du platine en milieux organiques en présence d'électrolytes supports, organiques et inorganiques, a été étudié par électrochimie. La réaction de réduction du platine dans ces milieux a été suivie *in situ* en utilisant la microscopie à force atomique couplée à l'électrochimie EC-AFM. Cette étude a permis de visualiser des modifications mor-

phologiques de la surface du platine après réduction. Ces nouvelles phases organométalliques formées après polarisation cathodique présentent un pouvoir réducteur important, et peuvent réduire spontanément diverses espèces organiques. A partir de cette propriété, la réactivité de ces phases électrogénérées vis-à-vis des sels de diazonium a été ensuite envisagée pour conduire au greffage de groupements aryles sur la surface du platine modifié. L'usage de la microscopie électrochimique à balayage SECM a permis à la fois d'induire et de suivre la modification locale du platine par l'intermédiaire d'un radical anion, ainsi que la détermination des propriétés de la phase organométallique. Enfin, l'analyse par XPS du platine réduit a montré l'existence d'un platine chargé négativement. Ces travaux ont fait l'objet de six publications dans des journaux internationaux.

Après sa thèse, Jalal Ghilane a effectué un stage post-doctoral à l'Université du Texas à Austin dans le groupe du professeur A.J. Bard.

Divisions

Catalyse

12-16 septembre 2007

5th Paul Sabatier
conference on catalysis
Catalysis contributions
to key societal challenges
Ottrott

La conférence Paul Sabatier fait partie du cycle des conférences européennes qui se déroulent sur quatre années avec la conférence Roermond (Hollande), la conférence Schwab (Allemagne), pour se clore la dernière année par le congrès international de catalyse.

Le nombre de participants est limité à 150 pour permettre les discussions après chaque présentation.

Programme prévisionnel des conférenciers invités :

- M. Beller : *Molecular-defined catalysis.*
- H.U. Blaser : *Catalysis in pharmaceutical industries.*
- G. Centi : *Evolution of catalysis.*
- P. Jacobs : *Heterogeneous catalysis related to energy renewable feedstocks.*
- K. de Jong : *New methodology in catalysis.*
- E. Lox : *Automotive pollution control.*
- D. Mansuy : *Biocatalysis and adaptation to substrate and environment diversity.*

- D. Marini : *Economical and geopolitical aspects of chemical industries.*
- R. Schlögl : *General synthesis on the catalysis contribution to society.*
- R. Sheldon : *Green chemistry in heterogeneous catalysis.*
- G. Somorjai : *Model catalysts and probe molecules.*
- C. Travers : *Unsolved problems in refinery.*
- P. van Leeuwen : *Main reactions in homogeneous catalysis.*
- <http://www.sfc.fr/DivCata/P-Sabatier-Conference07.pdf>

Chimie Physique

2-5 octobre 2007

JFJPC9

9^e Journées francophones des jeunes physico-chimistes

Maubuisson

Depuis leur création en 1992, ces journées qui ont lieu tous les deux ans ont pour vocation de proposer aux jeunes chercheurs des laboratoires publics ou industriels, un lieu de rencontres et d'échanges scientifiques interdisciplinaires autour des principaux thèmes de recherche de la physico-chimie.

Chaque demi-journée sera introduite par une conférence plénière présentée par un chercheur confirmé. Elle sera suivie d'une conférence invitée et de communications orales présentées par des jeunes chercheurs ou des doctorants. Par ailleurs, des séances posters seront organisées afin de faciliter les discussions et échanges entre les chercheurs. Thèmes au programme : Chimie analytique ; Méthodes de modélisation, de simulations et de chimie théorique ; Spectroscopie (techniques récemment développées) ; Electrochimie-photochimie ; Matériaux et nanosciences ; Matière molle et polymères ; Environnement ; Interface physico-chimie-biologie.

Dates limites de soumission des communications scientifiques : **avant le 15 mai 2007** pour une communication orale et **avant le 15 juin 2007** pour un poster.

La participation des étudiants, des doctorants et des jeunes chercheurs sera éventuellement soutenue à travers un nombre limité de bourses (à solliciter lors de la soumission du résumé de communication).

- <http://www.jfjpc9.org>

Parrainages

21-24 mai 2007

Spectr'Atom 2007

Pau

Pour sa troisième édition, la ville de Pau accueillera à nouveau ce forum d'échange francophone dédié à la spectrométrie atomique qui, tous les deux ans, regroupe les participants, du technicien à l'ingénieur, et les constructeurs de matériel. Son but : contribuer au développement des différents secteurs de cette discipline analytique. Cela concerne tout autant la spectrométrie d'absorption, de fluorescence ou d'émission atomique, que la fluorescence X ou les applications spécifiques de la spectrométrie de masse à courant inductif (ICP-MS), telles que la détermination à très haute précision des rapports isotopiques, l'analyse d'ultratraces ou la spéciation des éléments traces, avec de nombreuses applications (biologiques et cliniques, environnement).

- <http://www.spectratom.com>

25-27 juin 2007

ISPO'07

5th International workshop of silicon-based polymers

Montpellier

Depuis la fin des années soixante, Montpellier a acquis une réputation internationale en chimie du silicium, plus particulièrement en chimie douce et en synthèse de silicones fonctionnels pour des applications niches.

Cette année, le congrès est centré sur la synthèse de polymères siliciés de toutes sortes, avec une mention spéciale pour les assemblages supramoléculaires de polydiméthylsiloxanes et/ou de copolymères à blocs. Une session spéciale sur les matériaux polymères et leurs applications sera également proposée, afin de renforcer les échanges entre universitaires et industriels.

Au programme :

- *Controlling the internal morphology of silicone elastomers: using self-assembly of surfactants inside silicones*, par M. Brook (MacMaster University, Canada).
- *Self-assembling polymers based on silicon and transition metals*, par I. Manners (University of Bristol, Royaume-Uni).
- *Polycarbosilanes: from ceramic precursors to functional polymeric materials for electronic applications*, par L. Interrante

(Rensselaer Polytechnic Institute, États-Unis).

- *Interpenetrated networks from polysiloxanes: synthesis and properties*, par D. Teyssie (Université de Cergy-Pontoise).

- *Organic-inorganic hybrids: nanostructures and properties*, par U. Wiesner (Cornell University, États-Unis).

- *Silicon-based polymer-derived ceramics: synthesis, properties and application*, par R. Riedel (Darmstadt University of Technology, Allemagne).

- *Self-assembly and functionalization of hybrid organosilica*, par A. Mehdi (Montpellier 2).

- *New structures in POSS system*, par Y. Kawakami (Institute of Science and Technology, Japon).

- *Monodisperse silicone oil droplets and their encapsulation with silica shells*, par B. Vincent (University of Bristol, Royaume-Uni).

- *Emulsion polymerization of cyclosiloxanes: achievements and challenges*, par L. Marteaux (Dow Corning, Belgique).

- *Silicones: micro, macro, the design of a formulation and its requirements*, par L. Vovelle (Bluestar Silicones, St Fons)

Date limite d'inscription : 1^{er} avril 2007

- <http://www.enscm.fr/ispo2007.htm>

29-31 août 2007

Euro Food Chem XIV

« Chemistry of food, molecular gastronomy and chemistry of food processing »

Paris

Chercheurs, spécialistes, industriels et commerciaux du monde entier, tous concernés par la qualité des produits alimentaires et la chimie des aliments, seront au rendez-vous de ce fameux congrès gastronomique, organisé par l'EuChems, le Cercle des Sciences Analytiques (SCA) et la SFC.

Une trentaine de conférences sont attendues sur les thèmes suivants :

- Possibilities and limitations of molecular science for the characterization of authenticity and typicality (coord. : L. Simon-Sarkadi et H. Sørensen).
- Molecular gastronomy: objectives, development, international collaboration (coord. : H. This et J. Ventenas).
- Analytical, technological and nutritional aspects of flavour (coord. : R. Amadò, H. Sørensen et W. Pfannhauser).
- Avoiding formation of undesirable molecules during food processing (coord. : R. Amadò, H. Steinhart, H. Sørensen et W. Pfannhauser).

Dîner de gala, dégustation de vins et de fromages sont également au programme... Un congrès à savourer !

- <http://www.eurofoodchem14.info>

A venir :

Formula V

19-22 novembre 2007 à Postdam (Allemagne)

Date limite de soumission des communications : 23 mars 2007

- <http://www.formulav.info>