



## Pascal LARREGARAY

Groupe de Chimie Théorique et Modélisation,  
Institut des Sciences Moléculaires (ISM, UMR 5255)  
Université Bordeaux-CNRS, 351 cours de la libération, 33405 Talence cedex – France  
tel: +33 (0) 54 000 29 61, [pascal.larregaray\[at\]u-bordeaux.fr](mailto:pascal.larregaray[at]u-bordeaux.fr)

## Positions

2022/...	Directeur Adjoint de l'ISM (Institut des Sciences Moléculaires, UMR 5255, 260+ membres dont 133 permanents), Université Bordeaux /CNRS, directeur : Pr. E. Fouquet
2015/ ...	Co-directeur du Laboratoire Transfrontalier Conjoint (LTC) QuantumChemPhys Lab U.Bordeaux, UPV-EHU, DIPIC (Pays Basque)
2016/...	Directeur de recherche au CNRS, Actuellement nommé à l'ISM.
2016/2021	Responsable du groupe de Chimie Théorique de l'ISM (13 perm., 2 émérites, +/- 10 post-doct. et doct.)
2004/2016	Chargé de recherche au CNRS.
2003/2004	1 <sup>er</sup> Assistant au LSU (Laboratoire de Spectroscopie Ultrarapide), Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (Suisse)
2002	Post-doctorat au CERMM (Centre de Recherche en Modélisation Moléculaire) Université Concordia Montréal, Canada)

## Formation

2012	Habilitation à diriger les recherches (HDR), Université Bordeaux I
2011	Doctorat en sciences de l'Université Bordeaux I, spécialité : chimie-physique
1998	Diplôme d'Études Approfondies (DEA) de Matière Condensée : "Chimie et Organisation", Université Pierre et Marie Curie (Paris VI)
1998	Diplôme d'ingénieur de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP- Chimie Paris Tech)
1994/1996	Licence et Maîtrise de Chimie-Physique, Université Bordeaux I

## Recherches

ORCID: 0000-0002-1643-3164

- Dynamique moléculaire / réactionnelle (semi-)classique
- Processus élémentaires gaz/ surface
- Théories statistiques des réactions chimiques

Mon activité actuelle se concentre sur l'étude théorique de la dynamique réactionnelle des processus élémentaires hétérogènes et en phase gazeuse. Dans le cadre de la dynamique classique, je développe et applique des modèles basés sur la simulation numérique et l'approche statistique de la réactivité chimique, incluant les corrections semi-classiques nécessaires pour tenir compte des principaux effets quantiques. Ces modèles sont utilisés pour décrire les processus en phase gazeuse d'intérêt interstellaire ou atmosphérique ainsi que les réactions gaz-surfaces métalliques d'intérêt technologique (entrée dans l'atmosphère, fusion nucléaire). L'un des objectifs est d'examiner le couplage entre la dynamique des électrons et celle des noyaux (transitions non adiabatiques, excitations de paires électron-trou) ainsi que le rôle des mouvements des atomes de surface dans les processus hétérogènes (dissipation vers les phonons, relaxation locale).