



Cinquième réunion du technic'ARPE (16/03/2022)

La cinquième journée de notre réseau s'est tenue le mercredi 16 mars dernier à Paris et a rassemblé une petite vingtaine de personnes. Cette baisse de fréquentation, par rapport à la précédente édition en présentiel datant de 2019, s'explique vraisemblablement par l'incertitude sanitaire qui régnait encore en France au moment des inscriptions.

Cette journée a donné lieu à trois présentations orales : deux présentations par trois membres du réseau et une présentation par un conférencier invité. Notre volonté d'un programme allégé avait pour objectif de permettre les discussions et de favoriser la reprise de contact après cette longue interruption sanitaire. Pour finir cette journée, un bilan sur les actions de notre réseau a également été fait.

1) Présentations:

Hervé Vezin nous a présenté et expliqué le mode de fonctionnement de consoles Bruker de plusieurs générations : Elexsys I (1999-2008), Elexsys II (2008-2015) et Elexsys III (après 2016). Quels sont les différentes cartes, les différents modules ? Comment communiquent-ils entre eux ? etc. Il en a profité pour préciser et encourager, en cas de besoin, la jouvence partielle des vieux spectromètres (module par module) qui serait plus intéressante financièrement. Attention, la maintenance des anciens modèles n'est plus assurée par Bruker.

Florian Molton et moi-même avons ensuite évoqué l'apport des interfaces graphiques réalisées sous Matlab avec l'aide de certaines fonctions EasySpin, en terme d'interactivités et pour surmonter d'éventuelles difficultés de programmation. Nous avons d'abord parler de simulation. J'ai présenté SimLabel dédié à la simulation de spectres RPE cw de nitroxydes pour le marquage de spin (un ou deux couplages hyperfins possibles, température ambiante ou solution gelée ,...) (<https://easyspin.org/forum/viewtopic.php?f=8&t=297>), puis Florian nous a présenté SimultiSpin pour la simulation des spectres cw de métaux ($S \geq 1/2$, avec un ou deux couplages hyperfins possibles, en mode parallèle ou perpendiculaire,...) (<https://easyspin.org/forum/viewtopic.php?f=8&t=614>). Ensuite j'ai présenté quelques-unes des interfaces graphiques que j'ai développées pour le traitement des données RPE cw (<https://bip.cnrs.fr/epr-facility/software-and-scripts>).

2) Conférence invitée:

Romain Jarrier, du laboratoire de chimie Physique – Matière et Rayonnement (UMR 7614 – Sorbonne Université et CNRS), membre du réseau des technologies du vide, a gentiment accepté de nous faire une introduction aux techniques du vide. Après nous avoir présenté ce



réseau, il nous a rappelé des notions théoriques sur le vide et sur la cinétique des gaz, pour évoquer ensuite les calculs de pression et les vitesses de pompage. Enfin, il a abordé des aspects plus pratiques du vide avec des précisions sur les différents types de brides existantes, les différents types de pompes (volumétrique, cinétique et à fixation) et les catégories de vide associées, et enfin les différentes jauges pour les mesures de pression

3) Actions en cours et à venir, table ronde:

Lors de la session de discussion, Nadia Touati et moi-même avons commencé par remercier Nolwenn Le Breton et Sonia Lajnef d'avoir accepté de nous rejoindre pour animer le technic'ARPE, suite à notre appel en ligne en 2021.

Nous avons ensuite expliqué que la crise sanitaire avait fortement freiné la dynamique autour du technic'ARPE et de ses actions lancées avant 2020 (carte de France des spectromètres RPE, mécoles techniques). La sortie progressive de cette crise va évidemment redynamiser notre équipe pour tenter de mener à bien ces projets.

Vu le nombre de personnes intéressées, une réflexion avancée autour d'une mécole EasySpin avait été menée fin 2019. Elle sera reprise. Une réflexion autour d'une mécole bande Q et/ou ENDOR pourrait également être menée.

Soroush Abbasi Zargaleh a relancé l'idée d'une base de données de spectres RPE dans laquelle il imagine intégrer de l'intelligence artificielle. Pour rappel, un projet assez similaire avait été proposé avec une idée d'interfaçage avec Xepr et il avait été abandonné pour différentes raisons. Lors de cette discussion, nous avons abordé les difficultés rencontrées sur ce type de projet comme le manque de temps des chercheurs à accorder ou encore la redondance avec le groupe de travail Infranalytics sur la base de données.

Cependant Technic'Arpe proposera sûrement à Souroush de nous exposer brièvement son projet lors de la prochaine journée du technic'ARPE, si d'ici-là il ne s'est pas rapproché du groupe de travail dédié d'Infranalytics.

Pour finir, nous avons évoqué les possibilités d'Up-grade de nos spectromètres par la société Spinflex avec des prix pratiqués très inférieurs à ceux de la société Bruker.

Pour le technic'ARPE,

Emilien ETIENNE