

Jeudi 9 Novembre 2017

Session d'ouverture

8:50 | **Introduction aux Journées TouCAM**
Anne Hémerlyck, Marie Brut (LAAS), Fabienne Alary (LCPQ)

Modérateur Marie Brut (LAAS)

9:00 | **O11. Présentation du CECAM-FR-GSO**
Fernand Spiegelman (CECAM)

9:15 | **O12. Présentation du MésoCentre CALMIP**
Jean-Luc Estivalezes, Nicolas Renon (CALMIP)

Session 1. Réactivité

Modérateur Nadine Halberstadt (LCAR)

9:45 | **O1. Caractérisation expérimentale et théorique d'oligomères d'amidure de zinc ou d'étain formés durant la synthèse de nanoparticules d'oxyde métallique**
Christine Lepetit (LCC)

10:05 | **O2. Terminal Uranium sulfido and hydrosulfido complexes: Theoretical study of the uranium-sulfur bond**
Carlos Alvarez Lamsfus, (LPCNO)

10:25 | **O3. The effect of external electric field on Ru(DBM)₂ molecule: A quantum chemical analysis**
Amine Moukapir (CEMES)

10:45 | *Pause Café*

Session 2. Méthodes I

Modérateur Philippe Carbonnière (IPREM)

11:10 | **O4. Dressing the CI matrix with explicit correlation**
Pierre-Francois Loos (LCPQ)

11:30 | **O5. Hybrid stochastic-deterministic calculation of the second-order perturbative contribution of multireference perturbation theory**
Yann Garniron (LCPQ)

11:50 | **O6. Modeling quantum mechanics by a set of interacting trajectories**
Lidice Cruz-Rodriguez (LCAR)

12:10 | **O7. Hybrid parallelization of the Multi-TRRT algorithm: Application to highly-flexible biomolecules**
Alejandro Estana (LAAS)

12:30 | *Buffet – Session Posters*

Session 3. Industriel

Modérateur Simona Ispas (L2C)

14:30 | **O13. Développement d'une stratégie de simulation moléculaire multi-échelles : application aux matériaux polymères**
Dr Patrice Malfreyt (Institut de Chimie de Clermont Ferrand, Labo Commun SiMatLab)

Session 4. Matériaux I

15:10 | **O8. Simulation multi-échelle de l'influence de l'irradiation sur les composants électroniques**
Antoine Jay (ISAE)

15:30 | **O9. Diffusion des interstitiels dans les métaux**
Damien Connétable (CIRIMAT)

15:50 | *Pause Café*

Session 5. Matériaux II

Modérateur Magali Benoit (CEMES)

- 16:20 | **O10. Importance d'un traitement purement quantique des propriétés de fractionnement isotopique à l'équilibre des espèces ioniques dissoutes: le cas de Li+(aq)**
Merlin Méheut (GET)
- 16:40 | **O11. Fractionnement isotopique du zinc entre minéral et solution par calcul DFT**
Marc Blanchard (GET)
- 17:00 | **O12. Étudier la dynamique et le confinement des ions dans les supercondensateurs par des simulations**
Céline Merlet (CIRIMAT)
- 18:00 | *Mixing Event*

Vendredi 10 Novembre 2017

Session 6. Dynamique

Modérateur Jérôme Cuny (LCPQ)

- 9:30 | **O14. Modeling versus experiments, understanding, reproducing and/or predicting?**
Dr Layla Martin Samos (CNR et Univ Nova Gorica)
- 10:10 | *Pause Café*
- 10:40 | **O13. Modélisation de systèmes membranaires par modélisation Gros-Grains : de l'échelle nano à la dimension meso**
Matthieu Chavent (IPBS)
- 11:00 | **O14. Distribution de l'eau dans le site catalytique des oncoprotéines N-Ras**
Ruth Tichauer (LAAS)
- 11:20 | **O15. Modeling of Interaction between the Focal Adhesion Kinase (FAK) and Protein Kinase C theta (PKCθ)**
Georges Czaplicki (IPBS)
- 11:40 | **O16. Molecular alignment of CH3I-4He**
Patricia Vindel-Zandbergen (LCAR)
- 12:00 | *Buffet – Session Posters*

Session 7. Méthodes II

Modérateur Christophe Raynaud (ICGM)

- 14:00 | **O17. Méthodes CASSCF, RASSCF et GASSCF**
Nadia Ben Amor (LCPQ)
- 14:20 | **O18. Implémentation et calculs de spectres IR et Raman au-delà de l'approximation harmonique pour les systèmes périodiques (polymère, surface, cristal)**
Philippe Carbonnière (IPREM)

Session 8. Etats excités

- 14:40 | **O19. Second-order difference density matrices for effective orbital relaxation - Topological insights**
Thibaud Etienne (ICGM)
- 15:00 | **O20. Propriétés structurales et photophysiques du 3-hexylthiophène (P3HT) : études expérimentale et théorique combinées**
Léa Farouil (LCPQ)
- 15:20 | **O21. La méthode 'Nudged Elastic Band' : un outil puissant en photochimie théorique**
Isabelle Dixon (LCPQ)
- 15:40 | *Conclusion*