

Jeudi 7 Novembre 2019

Session d'ouverture 1

9:00 | Introduction aux Journées TouCAM
C. Lacaze-Dufaure (CIRIMAT)

Modérateur C. Lacaze-Dufaure (CIRIMAT)

9:10 | **OI1. Présentation du MésoCentre CALMIP**
J-L. Estivalezes, N. Renon, E. Courcelle (CALMIP)

9:35 | **OI2. Le calcul atomique et moléculaire sur le centre national CINES**
E. Boyer (CINES)

Session 1. Méthodes

Modérateur à définir

9:55 | **OI3. Comprendre la cinétique atomique des matériaux complexes avec la technique d'activation et de relaxation?**
N. Mousseau (Université de Montréal, Canada)

10:35 | *Pause Café*

11:00 | **O1. Implémentations Synchrones et Asynchrones de la méthode Parallel Tempering Molecular Dynamics (PTMD) dans les codes deMonNano et deMon2k**
F. Louisnard (LCPQ)

11:20 | **O2. Descriptor of a local environment combining topology and geometry, for atom-resolved off-lattice kMC**
M. Gunde (LAAS-CNRS)

11:40 | **O3. Une nouvelle approche pour l'exploration du paysage énergétique à l'échelle moléculaire**
L. Foulon (LAAS-CNRS)

12:00 | *Buffet – Session Posters*

Session 2. Systèmes Biologiques

Modérateur à définir

14:00 | **OI4. Getting to know a biological target: about the structural plasticity of HSP90 and binding kinetics with its ligands**
M. Bianciotto (Sanofi)

14:40 | **O4. Modélisation du complexe de la ghréline avec son récepteur GHSR**
G. Czaplicki (IPBS)

15:00 | **O5. Investigating Ion-Exchange Adsorption of Proteins through Experiments and Molecular Dynamics Simulations**
J. Esque (TBI)

15:20 | *Pause Café*

Session 3. Réactivité chimique et propriétés spectroscopiques

Modérateur à définir

15:50 | **O6. Mécanismes de photolibération de ligands : nouveaux états 3MC dans des complexes de ruthénium**
I. Dixon (LCPQ)

16:10 | **O7. Size-dependent proton localization in hydrated uracil clusters**
L. Zheng (LCPQ)

16:30 | **O8. Supported lanthanide catalysts: Role of the grafting on the stereochemical outcome of β -butyrolactone ROP reaction.**
A. Bathellier (LPCNO)

16:50 | **O9. Caractérisation spectroscopique de la diversité structurale d'agrégats carbonés d'intérêt astrophysique (C60)**
C. Dubosq (LCPQ)

18:00 | *Social Event – Hoegaarden Café*

Vendredi 8 Novembre 2019

Session d'ouverture 2

Modérateur à définir

- 9:00 | **O15. Présentation du CECAM-FR-GSO**
F. Spiegelman (CECAM)
- 9:10 | **O16. Présentation du Laboratoire « Les 2 Infinis »**
J. Stark (L2IT)
- 9:20 | **O17. Présentation du RTCF**
P. Carbonnière (IPREM)

Session 4. Matériaux

Modérateur à définir

- 9:30 | **O18. Etude *ab initio* des propriétés diélectriques, structurales et dynamiques de différents matériaux pour le stockage et la production d'énergie**
P. Baranek (EDF)
- 10:10 | **O10. Rashba spin-orbit coupling in transition-metal oxides**
J. Gosteau (CEMES)
- 10:30 | *Pause Café*
- 11:00 | **O11. Quantitative description of structural properties of point defects from first principles: the E center in silicon**
G. Herrero Saboya (CEA-DAM/LAAS-CNRS)
- 11:20 | **O12. Fracture of silicates glasses: Insight from large-scale classical MD simulations**
S. Ispas (L2C)
- 11:40 | **O13. Simulation of Displacement Damage induced by Irradiation in Si-Ge alloys**
T. Jarrin (CEA-DAM/LAAS-CNRS)
- 12:00 | *Buffet – Session Posters*

Session 5. Surfaces et Interfaces

Modérateur à définir

- 14:00 | **O14. Composés apatitiques : Apport des méthodes numériques**
C. Drouet (CIRIMAT)
- 14:20 | **O15. Étude par DFT des molécules 8HQX comme inhibiteurs verts de corrosion de l'aluminium**
Y. Bulteau (CIRIMAT)
- 14:40 | **O16. Estimations théoriques du fractionnement des isotopes du Ca entre solide et solution**
M. Méheut (GET)
- 15:00 | **O17. Ab initio study of dendritification phenomenon on lithium metal batteries interfaces**
A. Hagopian (ICG)
- 15:20 | **O18. Poly-epoxy polymers: an exploration from bulk to polymerized surface at the atomic scale**
K. Anand (CIRIMAT)
- 15:40 | *Conclusion*