

Réseau Français de Chimie Théorique
 Journée annuelle du pôle ouest
 18 décembre 2015



Université de Nantes, laboratoire CEISAM
2 rue de la houssinière, bâtiment 22, salle Marie Curie

Les sessions plénières (P) et les communications orales (CO) sont, respectivement, de 40 minutes et de 25 minutes. Ces périodes incluent les 5-10 minutes de questions-réponses.

A. LAURENT	09H30	P1	O. Delalande , IGDR, Univ Rennes 1 <i>Interactive simulation tools for the building of large (bio-)molecular assemblies</i>
	10H10	O1	M. Pouvreau SUBATECH, Nantes <i>Structure et dynamique des bordures de feuillets de particules argileuses hydratées : améliorer les modèles classiques via calculs DFT</i>
10H35		<i>Pause café/thé</i>	
T. CAUCHY	11H00	O2	L. Bouëssel du Bourg , CTI, ISCR, Univ Rennes 1 <i>Structure et propriétés physiques de verre de chalcogénures par dynamique moléculaire (ab initio) et spectroscopie RMN.</i>
	11H25	O3	J. Rio , IMN, Univ Nantes <i>Nouveaux nanosystèmes carbonés: molécules, nanomatériaux et hybrides</i>
	11H50	O4	B. Boucher , ISCR, Univ Rennes 1 <i>Chemical bonding analysis (via QTAIM, ELI-D) applied on oblatodimetallaboranes and their analogues in AIB2-structure type</i>
12H15		<i>Buffet – RU Tertre</i>	
M. KEPENEKIAN R. MAURICE	14H00	P2	M. Chabbert , BNMI, Univ Angers <i>De l'analyse des séquences à la dynamique moléculaire : Une approche évolutive des récepteurs couplés aux protéines G</i>
	14H40	O5	A. Fihey , CEISAM, Univ Nantes <i>Analyse et Prédiction du Comportement Optique de Multi-Interrupteurs Complexes</i>
	15H05	O6	D. Saponi , FOTON, ISCR, INSA Rennes <i>Confinements quantiques et diélectriques et effet Rashba dans les pérovskites hybrides 2D et 3D</i>
	15H30	O7	S. Mahajan , UFIP, Univ Nantes <i>Identification and modeling of functionally relevant normal modes of proteins</i>
	15H55	O8	A. Gelle , IPR, Rennes <i>Calcul ab initio des charges atomiques</i>
16H20		<i>Table ronde animée par K. Costuas</i>	

Ordre du jour de la table ronde

1. Les acteurs dans l'ouest en modélisation et simulation (biologie, chimie, physique).
Quelle structuration dans le cadre de l'UBL ?
2. Positionnement national : sous-division de modélisation et simulation commune à la *Société chimique de France* et à la *société française de physique* + *Groupe de Graphisme et Modélisation Moléculaire*
3. Formation universitaire, cours en ligne ; bilan et perspectives
4. Parc informatique : clusters locaux, plateformes de calcul ; bilan et prospective
5. Questions diverses

Venir au CEISAM

En voiture:

Il est préférable d'arriver par le 2 rue de la Houssinière (Entrée Nord du Campus)

1ère possibilité

Prendre le périphérique Nord, Sortir à la Porte de Rennes et suivre " *Universités* ", puis *Rectorat- Faculté des Sciences*.

2ème possibilité

A partir de la *Porte de Gesvres* (Périphérique Nord), prendre le *périphérique Est* et sortir à la *Porte de la Chapelle* . Prendre ensuite la direction *Nantes Nord-Université* , puis *Rectorat-Faculté des Sciences* .

Par le train:

De la gare (sortie Nord), Tramway Ligne 1 (Dir. François Mitterrand) jusque l'arrêt "*Commerce* " ,

puis Tramway Ligne 2 (Dir. Orvault Grand-Val) jusque l'arrêt " Arrêt *Michelet-Sciences*"

