

Journée du pôle ouest
17 octobre 2016, ENSCR, RENNES

Pôle Ouest - Réseau français de chimie théorique



La journée se déroulera à l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes (ENSCR, <https://www.ensc-rennes.fr/plan-dacces/>), dans l'**amphithéâtre C**.

Isabelle BRAEMS	09H30 - 10H00	P1	Mikaël KÉPÉNÉKIAN - ISCR - CNRS Univ. Rennes 1 <i>"Towards highly cooperative spin-crossover metal-organic frameworks on metallic surfaces"</i>
	10H00 - 10H20	O1	Soline BOYER-RICHARD - FOTON - INSA Rennes <i>"Liaisons fortes pour les pérovskites hybrides"</i>
	10H20 - 10H40	O2	Iuliia ANDRONIUK - SUBATECH - Nantes <i>"Interaction of gluconate and uranyl ions with calcium silicate hydrate phases"</i>
10H40 - 11H05		Pause café	
Nicolas GALLAND	11H05 - 11H25	O3	Guillaume LE DAIN - IMN - Nantes <i>"Multiscale approach for simulation of deep silicon etching using Bosch plasma process"</i>
	11H25 - 11H45	O4	Benoit DAVID - UFIP - Univ. Nantes <i>"Converting glycosidases into transglycosidases through internal water dynamics engineering"</i>
	11H45 - 12H05	O5	Thomas GROIZARD - ISCR - Univ. Rennes 1 <i>"Computational investigation of quantum-dot cellular automata"</i>
	12H05 - 12H25	O6	Guglielmo FERNANDEZ GARCIA - ISCR - Univ. Rennes 1 <i>"Lanthanide Single Molecule Magnets from isolated to surface: a theoretical point of view"</i>
12H05 - 14H00		Repas	
Boris LE GUENNIC	14H00 - 14H30	P2	Jérôme GRATON - CEISAM - Univ. Nantes <i>"Probing Organic Fluorine Effects on Molecular Properties"</i>
	14H30 - 14H50	O7	Dominique MIAS-LUCQUIN - IGDR - Univ. Rennes 1 <i>"Dynamics and mechanics of the protein dystrophin in macromolecular complexes with actin and microtubules"</i>
	14H50 - 15H10	O8	Emilie BRUYER - ISCR - Univ. Rennes 1 <i>"Epitaxially-strained GeTe as a prototype material for a microscopic understanding of bulk Rashba properties"</i>
	15H10 - 15H30	O9	Gabriel MARCHAND - CEISAM - Univ. Nantes <i>"Azacalixpyrins: a New Class of Macrocycles with Attractive Optical Properties"</i>
15H30 - 16H30		Discussions autour de la simulation à l'échelle de l'atome dans l'ouest	
16H30		Pot de clôture	