

Réseau français de chimie théorique

Journée du pôle ouest

19 décembre 2014



Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes

Amphithéâtre C

- 09H30 Claudine Katan, ISCR, CNRS - Université de Rennes 1
Absorption biphotonique de chromophores solvatés : apport de la TD-DFT et des modèles
- 10H00 Thomas Cauchy, MOLTECH Anjou, Université d'Angers
ABSiCC ou le traitement automatique des informations en chimie théorique
- 11H00 Rémi Maurice, SUBATECH, Nantes
Modélisation de molécules et matériaux d'intérêt en radiochimie
- 11H30 Table ronde : organisation du réseau, enseignement, recherche...

Amphithéâtre B

- 14H00 Bernard Offmann, UFIP, CNRS - Université de Nantes
Application de la bioinformatique structurale en chimie-biologie : vers des robots olfactifs
- 14H30 Zakaria Alamiddine, CEISAM, Université de Nantes
Modélisation des interactions néonicotinoïdes-récepteurs nicotiques d'insectes par des approches quantiques
- 15H00 Jacky Even, FOTON, INSA Rennes
Pérovskites hybrides pour le photovoltaïque : quelques éléments pour une description théorique
- 15H30 Florent Boucher, IMN CNRS, Nantes
La modélisation à l'IMN autour des matériaux de batteries
- 16H00 Azziz Ghoufi, IPR, Université de Rennes 1
Liquides confinés à l'échelle nanométrique : Apport de la simulation moléculaire classique