

Atelier GDR MODMAT

Exploration du paysage énergétique : méthodes & applications

Du 14 au 16 Mai 2018

Salle de conférence, LAAS-CNRS, Toulouse

LUNDI 14 MAI

12 :30-13:45	Accueil & Buffet
13:45-14:00	Introduction
14:00-15:30	Session invité I Florent CALVO , Directeur de Recherche à l'Université Joseph Fourier de Grenoble : « Échantillonnage discret des configurations et des chemins réactionnels: optimisation globale, thermodynamique et cinétique »
15:30-16:00	Pause Café
16:00-17:30	- Kévin KEMPFER – Description multi-échelle réaliste de l'interaction polymère-silice par simulation numérique - Cédric MASTAIL – Etude multi-échelle de l'influence des paramètres de dépôt sur les propriétés microstructurales de films minces de nitrure de métaux de transition déposé par pulvérisation magnétron en incidence oblique: couplage entre simulation kMC et expérience - Julien LAM - Crystallization in nanopore, coarse-graining the solvent-mediated forces
	Soirée libre

MARDI 15 MAI

09:00-10:30	Session invité II Marco SAITTA , Professeur à l'UPMC, Paris: « Exploration of reaction networks and chemical spaces from ab initio free-energy methods »
10:30-11 :00	Pause Café
11:00-12:30	- Ruth TICHAUER - Estimation énergétique de divers chemins réactionnels pour l'hydrolyse du GTP dans le site actif de NRas - Amine MOUKAPIR - The effect of external electric field on Ru(DBM) ₂ molecule : DFT (B3LYP/SBKJC) study - Emilie GAUDRY - The complex energy landscape of quasicrystalline approximant surfaces: application to catalysis
12:30-14:00	Buffet & Posters
14:00-15:30	Session invité III Normand MOUSSEAU , Professeur à l'Université de Montréal, Canada : « Comment simuler la cinétique des atomes sur des temps macroscopiques: la technique d'activation et de relaxation cinétique »
15:30-16:00	Pause Café
16:00-17:30	- Nicolas SALLES - Couplage entre Activation Relaxation Technique nouveau et le calcul ab initio: Une nouvelle approche pour explorer le paysage énergétique - Antoine JAY - Etude multi-niveaux de l'effet des radiations sur les capteurs d'image en silicium - Romain CANDELA - Influence du carbone sur une boucle d'auto-interstitiels dans le fer par simulations à l'échelle atomique
	Dîner en centre ville

MERCREDI 16 MAI

09:00-10:30	Session invité IV Manuel ATHENES chercheur au CEA de Saclay : « Méthodes de conditionnement et d'échantillonnage accéléré pour simuler les propriétés thermodynamiques et cinétiques de la matière condensée »
10:30-11 :00	Pause Café
11:00-12:30	- Antoine KRAYCH - Effet des contraintes non-glissiles sur l'anisotropie plastique du tungstène - Amélie BAROZET - Exploring the energy landscape of highly-flexible biomolecules with a forest of random trees - Damien CONNETABLE - Diffusion des interstitiels dans les métaux
12:30	Conclusion, Buffet & Départ