



PÔLE OUEST

DU RÉSEAU FRANÇAIS DE CHIMIE THÉORIQUE

Western Pole Scientific Day – December 1st, 2023

Poitiers University, Campus Science

UFR SFA – B.27, Poitiers

Plenary sessions (P) and oral communications (O) will last 45 and 20 minutes, respectively, including questions and/or comments.

	10H00	<i>Welcome breakfast</i>	
Chair 1	10H30	P1	Duncan Bossion , IPR, Université de Rennes 1, <i>Adiabatic dynamics for astrochemistry and methodological developments for non-adiabatic dynamics</i>
	11H15	O1	Alexandre Lebon , CEMCA, Université de Brest, <i>Hydrogen-storage capacity of slit pores of anisotropic 2D sheets. The case of borophene</i>
	11H35	O2	Veronica Crespi , Inserm U1248, Université de Limoges, <i>Deciphering the structural defects from SNP variants of ABCB4 transporter by means of molecular dynamics simulations</i>
	11H55	<i>- Lunch -</i>	
Chair 2	13H30	O3	Joseane Santos Almeida , ISCR - CTI, Université de Rennes 1, <i>Thermoelectric Ability of Organometallic Molecular Junctions</i>
	13H50	O4	Sylvain Pitié , IC2MP, Université de Poitiers, <i>Predicted High Energy Density MN8 (M, groups 1&2, d-elements) containing anionic 18-ring-based polynitrogen monolayers acting as cryptand</i>
	14H10	O5	Iryna Knysh , CEISAM, Nantes Université, <i>Excited-state dipoles of real-life dyes: BSE/GW vs TD-DFT</i>
	14H30	O6	Corentin Poidevin , ISCR - CTI, Université de Rennes 1, <i>Quantum description of functionalized nanoparticles for solar energy storage</i>
	14h50	<i>- Coffee/Tea break -</i>	
Chair 3	15H20	O7	Lina Fransen , CEISAM, Nantes Université, <i>Dissociation and isomerization following ionization of ethylene: insights from non-adiabatic dynamics simulations</i>
	15H40	O8	Maxime Vassaux , IPR, Université de Rennes 1, <i>Large-Scale Molecular Dynamics Elucidates the Mechanicsof Reinforcement in Graphene-Based Composites</i>
	16H00	<i>News from West Pole and ThéMoSiA National Federation</i>	
		--	

Se rendre au B27, UFR SFA (Campus Science)

En voiture :

Il est préférable d'arriver par l'avenue du Recteur Pineau. De nombreux parkings sont disponibles dans les environs des bâtiments B24 et B27 (repérés en gris sur le plan ci-dessous).

En transports en commun :

Le campus est desservi par les lignes de bus 1 (arrêt Cité U, noté "3" sur le plan ci-dessous) et 11 (arrêt Aubépines, noté "7" sur le plan ci-dessous). Les deux lignes desservent la gare SNCF, à l'arrêt Gare Viaduc. Pour accéder à cet arrêt, prendre la direction du parking Toumaï en sortant de la gare, et monter vers le viaduc Léon Blum (dernier étage du parking).

Sur le campus :

L'accès à la salle de réunion de l'IC2MP est possible par l'entrée du B7 (ouest), ou via le B27 (entrée est). Les pause café et le repas se tiendront en salle Pauling (Bâtiment B7, rez-de-chaussée). Une signalisation sera mise en place aux deux entrées.

