

Réseau Français de Chimie Théorique
Journée annuelle du pôle ouest
10 novembre 2017



Université de Nantes, 2 rue de la Houssinière, Laboratoire CEISAM (bat. 22), salle Marie Curie.

Les sessions plénières (P) et les communications orales (O) sont de 40 et de 20 minutes, respectivement (questions incluses).

Chair	09H30	P1	T. Niehaus , ILM, Univ. Claude Bernard Lyon 1. <i>Strengths and weaknesses of the approximate TD-DFT method TD-DFTB.</i>
	10H10	O1	B. Ngouana SUBATECH, Univ. Nantes. <i>Adsorption and diffusion of NORMs on the basal and lateral surfaces of Kaolinite, smectite and Muscovite.</i>
10H30		<i>Pause café/thé</i>	
Chair	10H50	O2	F. Di Meo , INSERM, Univ. Limoges. <i>Drug Membrane Permeation: Towards Semi-Quantitative Structure Permeation Relationship.</i>
	11H10	O3	B. Huang & G. Frapper , IC2MP, Univ. Poitiers. <i>Promising high-energy-density material: prediction of bis-pentazolate Ba(N5)2 and novel high-pressure Ba-N phases.</i>
	11H30	O4	B. Traore , ISCR, Univ Rennes 1. <i>Optoelectronic properties of hybrid layered perovskites.</i>
	11H50	O5	C. Guido , CEISAM, Nantes. <i>Polarizable schemes for simulating excited state processes in multichromophoric systems: from continuum to discrete environment description.</i>
12H10		<i>Buffet – RU Lombarderie</i>	
Chair	14H00	P2	C. Merlet , CIRIMAT, Univ Toulouse III Paul Sabatier. <i>Insights from simulations on the charge storage mechanisms and ion dynamics in nanoporous carbons for energy storage.</i>
	14H40	O6	P. Tsoulka , IMN, Univ. Nantes. <i>First-principle calculations combined with thermodynamic modeling: Study of the pseudobinary CuInSe2-CuGaSe2 system.</i>
	15H00	O7	B. Chantemargue , INSERM, Univ. Limoges. <i>Exploration of landscapes of ABC membrane exporters.</i>
	15H20	O8	R. Sousa , CEISAM, Univ. Nantes. <i>Clarification of the role of specific Interleukin-15 residues through Molecular Dynamics simulations.</i>
	15H40	O9	F. Gam , ISCR, Univ Rennes 1. <i>Structure électronique et propriétés optiques de superatomes de métaux du groupe 11 inspirés de clusters stables.</i>
	16H00	O10	V. Velusamy , UFIP, Univ Nantes. <i>Parameterization of the glucosylated aspartyl residue of a sucrose phosphorylase and applications for enzyme engineering.</i>
	16H20	Table ronde animée par les coordinateurs (Nouveautés au sein du pôle ouest: formation 2018, renouvellement du RFCT, parc informatique, questions diverses)	