



PÔLE OUEST

DU RÉSEAU FRANÇAIS DE CHIMIE THÉORIQUE

JOURNÉE SCIENTIFIQUE - 20 DÉCEMBRE 2018 :

Université de Rennes I, Pôle Numérique Rennes Beaulieu,
Campus Beaulieu, Rennes

Les sessions plénières (P) et les communications orales (O) sont de 45 et de 25 minutes, respectivement. Ces périodes incluent les 5-10 minutes de questions-réponses.

Chair 1	09H30	P1	E. Fromager , LCQ, Université de Strasbourg <i>Unified formulation of fundamental and optical gap problems in density-functional theory for ensembles</i>
	10H15	O1	P. Vérité , CEISAM, Université de Nantes <i>First-principle investigation of the double ESIPT process in a tiophene-based dye</i>
	10H40		- Pause café/thé -
Chair 2	11H00	O2	A. Lecomte , ISCR, Université de Rennes 1 <i>Defects in photovoltaic glass-ceramics materials based on doped-Sb₂Se₃</i>
	11H25	O3	A. Stoliaroff , IMN, Université de Nantes <i>β-In₂S₃ for photovoltaic devices: investigation of the native point defects with ab initio first-principle calculations</i>
	11H50	O4	I. Essafri , IPR, Université de Rennes 1 <i>Molecular dynamics simulations of confined liquids</i>
	12H15		- Buffet -
Chair 3	14H00	P2	F. Guégan , IC2MP, Université de Poitiers <i>Theoretical insight on the reactivity and selectivities of the silylzincation reaction of alkynes</i>
	14H45	O5	C. Gomez Pech , Subatech-IN2P3, Nantes <i>Effective Bond Orders and Topological Analyses from Relativistic and Multiconfigurational Calculations</i>
	15H10	O6	A. Viel , IPR, Université de Rennes 1 <i>NO₃ radical in full dimension including non adiabatic couplings</i>
	15H35	O7	F. Gendron , ISCR, Université de Rennes 1 <i>Calculs Ab-Initio de Propriétés Optiques dans des Complexes Chiraux</i>
	16H00		- Pause café/thé -
	16H15		Table Ronde

