

Jeudi  
7 Novembre  
2019

Université  
Paris-Sud  
amphi IPN -  
bât. 100

# Journée de Simulations Numériques en Chimie

## INSCRIPTION

[http://hebergement.u-psud.fr/  
simuchimie](http://hebergement.u-psud.fr/simuchimie)

avant le 3 novembre



FACULTÉ  
DES SCIENCES  
D'ORSAY



# Le programme

Amphi IPN -bât. 100

Accueil

9h  
9h15

- 9h15:** **Yann Le Bouar - LEM (ONERA)**  
*Modélisation et simulation numérique des alliages aéronautiques*
- 9h45:** **Angela Parise - LCP (UPSUD)**  
*Attosecond dynamics simulations of Glycine irradiated by alpha-particle*
- 10h05:** **Vinicio Oliveira Cavalcanti - IPN (UPSUD)**  
*Etude expérimentale et théorique du comportement de l'hélium aux interfaces Fe/Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> : application aux matériaux des centrales nucléaires du futur*

10h25  
11h00

Pause-Café

- 11h00:** **Tâp Ha-Duong - BIOCIS (UPSUD)**  
*Validation of MD simulations of intrinsically disordered proteins using NMR and SAXS experiments*
- 11h30:** **Satchin Soorkia - ISMO (UPSUD)**  
*Spectroscopie de photofragmentation UV en trappe à ions cryogénique : expériences et simulations*

- 14h:** **Isabelle Demachy - LCP (UPSUD)**  
*L'offre de formation de l'Université Paris-Saclay : objectifs et organisation*
- 14h30:** **Radhika Gupta - LCM (Polytechnique)**  
*Quantification of  $\pi$ -bond strengths: are similar results obtained through various approaches?*
- 14h50:** **Hakim Amara - LEM (ONERA)**  
*Appart de la simulation numérique à la compréhension du nanomonde*

12h  
14h

Buffet

15h20  
15h50

Pause-Café

- 15h50:** **Francesco Talotta - ISMO-LCP (UPSUD)**  
*How to take the radiationless phenomena with computational chemistry ?*
- 16h10:** **Daniel Peláez Ruiz - ISMO (UPSUD)**  
*Simulation de la spectroscopie infrarouge de systèmes fortement quantiques*

16h40

Conclusions