

Programme Journée thématique "Calcul simulation"
CEMHTI site HT (salle RMN), Orléans, 1er Décembre 2015

10h00 **Accueil**

10h30 : **Olivier ROZENBAUM**, Laboratoire ISTE, CNRS-Orléans

Microtomographie X et caractérisations de milieux complexes

Après avoir rappelé les principes de la tomographie X par absorption, j'illustrerai les problématiques liées à la segmentation de telles images 3D. Je parlerai ensuite des possibilités de l'analyse quantitative des matériaux par cette technique.

11h00 : **Maxime YON**, Laboratoire CEMHTI, CNRS-Orléans

Imagerie par résonance magnétique : du signal à l'image

L'Imagerie par Résonance Magnétique (IRM) permet d'obtenir des images 2D et 3D de façon non-invasive et non-ionisante. Son principe et le traitement, par Matlab, du signal obtenu dans les expériences classiques et rapides seront présentés.

11h30 : **Camille GAZEAU**, Laboratoire CEMHTI, CNRS-Orléans

Mesures de champs cinématiques par corrélation d'images

L'exposé présente la méthode de corrélation d'image (DIC) dans le but de mesurer les champs de déplacements macroscopiques lors d'un essai mécanique.

12h00 : **Pause Déjeuner (Buffet)**

14h00 : **Charlotte MARTINEAU**, Université de Versailles, CEMHTI-Orléans

Complémentarité DRX, RMN, calculs DFT pour la résolution structurale

La complémentarité entre les techniques de diffraction, RMN solide et les calculs DFT pour la résolution structurale sera illustrée sur des matériaux

inorganiques et hybrides. En particulier, les apports des calculs pour la description de l'ordre local, difficilement accessible par diffraction seule, seront présentés.

14h30 : **Kelly MACHADO**, Laboratoire CEMHTI, CNRS-Orléans

Calculs des déplacements chimiques RMN dans un bain de cryolite fondu en combinant simulations de dynamique moléculaire classique et calculs DFT

Pour calculer les déplacements chimiques RMN (^{19}F , ^{23}Na , ^{27}Al) dans le système ionique NaF-AlF₃ à haute température (1000°C) avec le code CASTEP, nous avons modélisé le liquide à partir de simulations de dynamique moléculaire. Pour réaliser ces simulations, nous avons développé un potentiel d'interaction atomique classique dans le cadre d'un modèle d'ions polarisables. Les paramètres du potentiel ont été ajustés à partir des forces, des dipôles et des tenseurs de contrainte obtenus par des calculs *ab-initio* effectués avec le code VASP.

15h00 : **Franck FAYON**, Laboratoire CEMHTI, CNRS-Orléans

Titre et résumé mystères

15h30 : **Fin de la journée**