

Programme Journée thématique "Calcul simulation"

CEMHTI site haute température (salle RMN), Orléans, 7 avril 2014

- 9h00** **Accueil**
- 9h15 :** Ouverture de la journée
- 9h30 :** Simona ISPAS, Laboratoire Charles Coulomb, Université Montpellier 2
Simulations de dynamique moléculaire ab-initio et classique de verres silicatés (structure, vibrations et diffusion)
- 10h00 :** Domingos DE SOUSA MENESES, CEMHTI - Polytech' Orléans
Apport de la spectroscopie infrarouge dans l'étude de la dynamique et de la structure de verres silicatés
- 10h30 :** Matthieu MICOULAUT, Laboratoire de physique théorique de la matière condensée, Université Paris 6
Contraintes topologiques : un outil pour explorer et comprendre les effets de composition dans les verres (méthodes de dynamique moléculaire classique et quantique Car-Parrinello)
- 11h00 :** **Pause café**
- 11h30 :** Mathieu ALLIX, CEMHTI
Mesures et calculs sur la transparence des céramiques denses
- 12h00 :** Filipe VASCONCELOS, CEA Saclay, DSM/IRAMIS/SIS2M/LSDRM
RMN premiers principes pour la caractérisation structurale et dynamique des verres d'oxydes: méthodologie et applications
- 12h30 :** Franck FAYON, CEMHTI
Titre à préciser
- 13h00 :** **Repas (Buffet)**
- 14h00 :** Sylvian CADARS, CEMHTI
Modélisation du désordre de substitution dans les solides cristallins et non-cristallins ordonnés à l'échelle moléculaire
- 14h30 :** Guillaume MARTIN, CEA Cadarache
Simulation de l'endommagement du dioxyde d'uranium sous irradiation

- 15h00 :** Marie-France BARTHE, CEMHTI
Modélisation et validation expérimentale des propriétés des défauts dans les matériaux pour le nucléaire
- 15h30 :** **Pause café**
- 16h00 :** Louis HENNET, CEMHTI
Structure et dynamique des liquides fondus. Expériences et simulations.
- 16h30 :** **Discussion**
- 17h00 :** **Fin de la journée**