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

Titre à préciser

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**