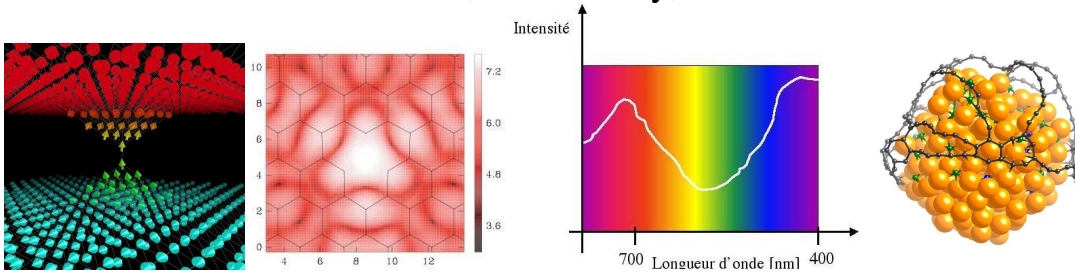


Réunion thématique IRAMIS

Structure électronique et Modélisation atomistique

Jeudi 3 Avril, CEA Saclay, Orme des Merisiers



L'objectif de cette journée est de réunir les chercheurs de l'IRAMIS impliqués dans les calculs de structure électronique (*ab-initio*, liaisons-fortes, Hückel etc..) et plus généralement dans la modélisation de la matière à l'échelle atomique, ce qui inclut également l'utilisation de méthodes plus phénoménologiques (potentiels empiriques, Hamiltoniens modèles, etc..)

En effet, de nombreux chercheurs de l'IRAMIS utilisent ou développent ces outils de modélisation dans des domaines assez variés: physique (spectroscopie, transport, magnétisme), chimie (réactivité, dynamique), matériaux (diffusion, croissance, défauts). Il y a donc matière à favoriser les échanges entre les différentes communautés sur le plan thématique, mais aussi par une mise en commun ou comparaison des outils de modélisation.

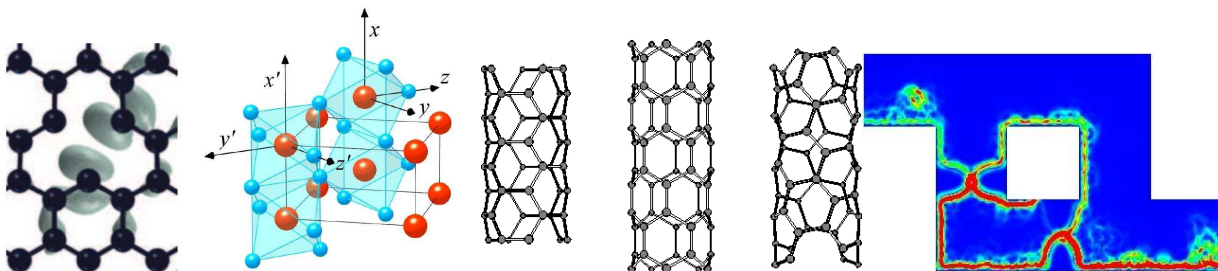
La journée s'organisera en une série d'une dizaine d'exposés oraux fournissant un panorama des activités des différents groupes.

Une longue séance posters au moment du déjeuner permettra d'avoir une vue plus exhaustive et détaillée des travaux de chacun et favorisera en outre les échanges.

4 grandes thématiques seront abordées:

- Structure et dynamique
- Chimie quantique
- Spectroscopie
- Transport, magnétisme et corrélations

La réunion aura lieu le 3 avril dans l'amphi Bloch à l'Orme des Merisiers (CEA Saclay). L'[IRAMIS](#) finance cette réunion nous permettant d'organiser un buffet le midi autour d'une séance posters.



Organisateurs :

Cyrille Barreteau/ Cindy Rountre/ Sylvain Latil/ Luc Barbier

CEA Saclay DSM/IRAMIS/SPCSI Batiment 462

email: cyrille.barreteau@cea.fr, cindy.rountree@cea.fr, sylvain.latil@cea.fr, luc.barbier@cea.fr