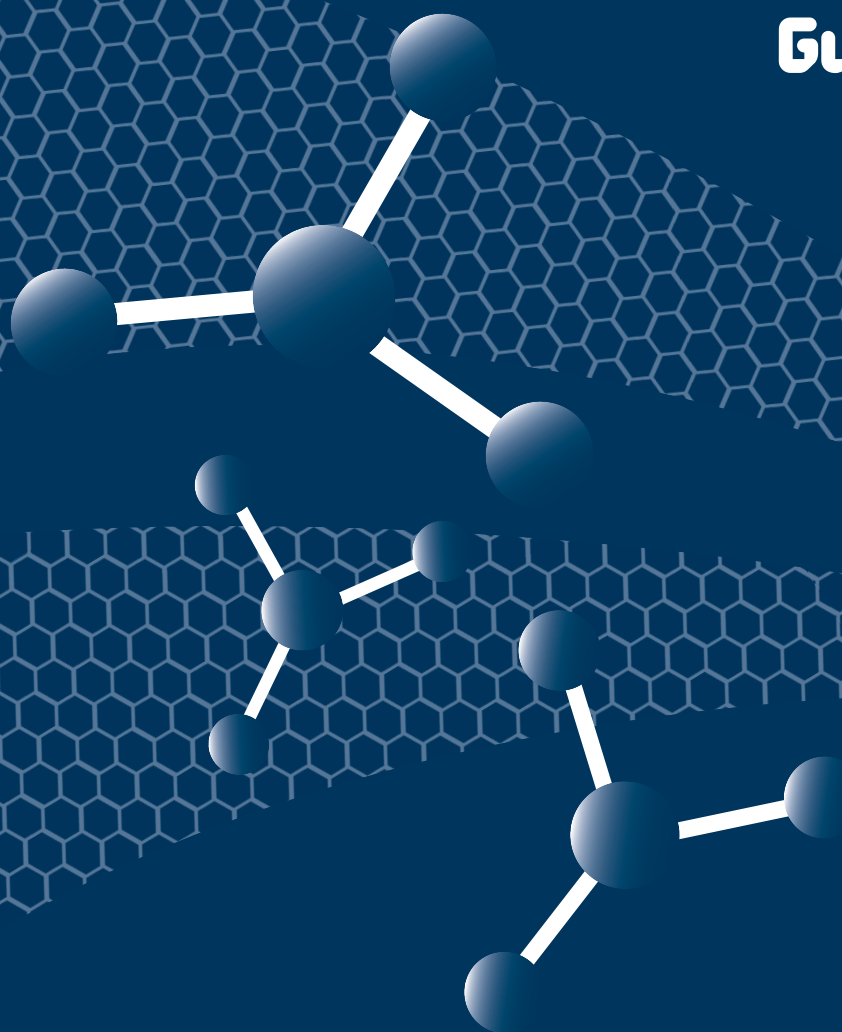


GDR CoDFT 2013

Guidel Plages (56)

du 21 au 24 mai



Fonctionnelle de la densité (DFT) et approches semi-empiriques

Contact : gdrcoDFT2013@cnrs-imn.fr

www.cnrs-imn.fr/GDRCoDFT2013



Speakers :

- Alejandro Franco, Université de Picardie Jules Verne, Amiens
- Denis Jacquemin, Université de Nantes
- Eric Furet, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes
- Jelena Sjakste, Ecole Polytechnique Palaiseau
- Gian-Marco Rignanese, Université Catholique de Louvain (UCL)
- Francesco Sottile, Ecole Polytechnique Palaiseau
- Gregory Geneste, CEA, DAM, Arpajon
- Marie-Laure Bocquet, CNRS ENS Lyon
- Mairbeck Chshiev, Université Joseph Fourier Grenoble
- Silke Biermann, Ecole Polytechnique Palaiseau

Programme

Mardi 21 Mai

12:30 Déjeuner

14:00 Accueil des Participants

15:50 Pause-café

16:20 INTRODUCTION
Xavier BLASE

Communication orale invitée

16:30 *Applications de la TD-DFT en chimie: vers la simulation précise des spectres optiques des molécules*
Denis JACQUEMIN, CEISAM, Nantes

Communications orales

17:10 *Matériaux organométalliques fonctionnels : apport de l'outil quantiques*
Karine COSTUAS, Institut des sciences chimiques de Rennes

17:30 *A la recherche de fonctionnelles GGA aux performances accrues : la « gradient-regulated connection »*
Pietro CORTONA, SPMS, Ecole Centrale Paris, Châtenay-Malabry

17:50 *N-Représentabilité en SDFT*
David GONTIER, CERMICS : Ecole des Ponts ParisTech et INRIA

18:10 Présentation Flash des Posters

18:40 Session Posters

20:00 Dîner

Mercredi 22 Mai

Communication orale invitée

- 09:00** *Long-range Coulomb interactions and dynamical screening in correlated materials: a dynamical mean field view*
Silke BIERMANN, Centre de Physique Théorique Ecole Polytechnique Palaiseau

Communications orales

- 09:40** *Thermodynamique de la transition de phase isostructurale dans le Cérium en DFT+DMFT*
Jordan BIEDER, CEA DAM DIF, Arpajon
- 10:00** *Temperature induced interorbital Coulomb correlations in strontium iridate Sr_2IrO_4*
Cyril MARTINS, Centre de Physique Théorique Ecole Polytechnique Palaiseau & CEA DAM DIF, Arpajon
- 10:20** *Amélioration de la description des fortes corrélations électroniques dans le dioxyde d'uranium : application de la DFT+U et de la DFT+DMFT*
Emerson VATHONNE, CEA, DEN, DEC, Centre de Cadarache, Saint-Paul-Lez-Durance

10:40 Pause-café

Communication orale invitée

- 11:10** *Promoting the inelastic mode of the STM to a routine use: a DFTbased approach*
Marie-Laure BOCQUET, Laboratoire de Chimie, ENS Lyon

Communications orales

- 11:50** *Spin crossover in a single $Fe(phen)_2(NCS)_2$ molecule adsorbed onto metallic substrates: an ab initio calculation*
Saber GUEDDIDA, Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg
- 12:10** *Étude ab initio du mécanisme de détection de molécules en surface d'oxydes de cuivre Cu_xO : application capteur de gaz*
Hela OUALI, IM2NP Marseille & URPSC Tunis

12:30 Déjeuner

Communication orale invitée

- 14:00** *First-principles calculations of electron-phonon coupling in semiconductors*
Jelena SJAKSTE, Laboratoire des Solides Irradiés CEA-DSM-IRAMIS, Palaiseau

Communications orales

- 14:40** *Computational spectroscopy using many-body perturbation theory: Large scale calculations without virtual orbitals*
Dario ROCCA, CRM2, Institut Jean Barriol, Vandoeuvre-lès-Nancy
- 15:00** *Strong excitonic effects in absorption spectrum of $SrTiO_3$ and the inclusion of dynamical effects*
Lorenzo SPONZA, Laboratoire des Solides Irradiés, Palaiseau & European Theoretical Spectroscopy Facility
- 15:20** *Many-body perturbation theory for charge transfer excitations in organic systems*
Ivan DUCHEMIN, INAC – CEA, Grenoble
- 15:40** *Raccordements de bandes et profils de constantes diélectriques pour des hétérostructures 2D à semiconducteurs*
Jacky EVEN, FOTON, INSA Rennes

16:00 Pause-café

Communication orale invitée

- 16:30** *Multiscale phase field modeling for the description of conversion reactions in lithium ion and lithium air batteries*
Alejandro FRANCO, LRCS Amiens et Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie (RS2E)

Communications orales

- 17:10** *Propriétés spectroscopiques des matériaux hybrides organique-inorganiques : développement d'un code parallèle TDDFT/DFT/MD*
Isabelle BARAILLE, IPREM-ECP, Pau
- 17:30** *Finite Temperature Properties of Ionized PAH Clusters*
Léo DONTOT, UPS, LCPQ, IRSAMC, Toulouse
- 17:50** *Simulation multi-échelle de la diffusion protonique dans $BaCeO_3$ dopé Gd*
Jessica HERMET, CEA, DAM, DIF, Arpajon & SPMS, ECP, Châtenay Malabry

18:10 Présentation Flash des Posters

18:40 Session Posters

20:00 Dîner

Jeudi 23 Mai

Communication orale invitée

09:00 *Simulation and modelling of spintronic phenomena in magnetic nanostructures and graphene*
Mairbek CHSHIEV, SPINTEC, CEA|CNRS|UJF-Grenoble & CEA-INAC, Grenoble

Communications orales

09:40 *Hydrogenated graphene edges along the $\langle 2\bar{1}\bar{1}0 \rangle$ direction*
Philipp WAGNER, Institut des sciences chimiques de Rennes

10:00 *Electronic properties of Twisted Bilayer Graphene with vacancies*
Jean-François JOBIDON, Institut Néel, Grenoble

10:20 *Graphène artificiel à fort couplage spin-orbite formé par auto-assemblage de nanocristaux de semiconducteurs*
Christophe DELERUE, IEMN- Dept. ISEN, Lille & Debye Institute for Nanomaterials Science, Utrecht

10:40 Pause-café

Communication orale invitée

11:10 *Effets quantiques des noyaux. Application aux phases denses de l'hydrogène*
Gregory GENESTE, CEA, DAM, DIF, Arpajon

Communications orales

11:50 *Mise en évidence et caractérisation des effets quantiques nucléaires en phase condensée*
Jérôme CUNY, LCPQ, IRSAMC, Toulouse

12:10 *Propriétés structurales et thermochimiques des molécules bérylliées*
François VIROT, IRSN, Centre de Cadarache, Saint Paul les Durance

12:30 Déjeuner

14:00 **Découverte autour de Guidel et du Pouldu (vélo, canoë/kayak, randonnée pédestre)**

16:30 Pause-café

Communication orale invitée

17:00 *Exciton dispersion in wide-gap insulators: there and back again*
Francesco SOTTILE, Laboratoire des Solides Irradiés, Palaiseau & European Theoretical Spectroscopy Facility

Communications orales

17:40 *Les spectres de photoélectrons revisités par la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps incluant la correction d'auto-interaction*
Phuong Mai DINH, Laboratoire de Physique Théorique, Toulouse

18:00 *Photoemission Spectra of CuO from First Principles : Quasiparticle Excitations and Beyond*
Claudia RÖDL, Laboratoire des Solides Irradiés, Palaiseau & European Theoretical Spectroscopy Facility

18:20 *Approche couplée expérience-théorie des interfaces solide/solide dans le matériaux de conversion CuO : propriétés thermodynamiques et nanostructuration*
Germain VALLVERDU, IPREM – ECP, Pau

18:40 *L'approximation GW pour les molécules : la concavité mise en évidence*
Fabien BRUNEVAL, Service de Recherches de Métallurgie Physique & CEA Saclay, Gif-sur-Yvette

19:00 Présentation TRANSTEC/PANASAS

19:30 Apéritif offert par TRANSTEC/PANASAS

20:00 Dîner de Gala

Vendredi 24 Mai

Communication orale invitée

09:00 *Accelerating materials discovery with ab initio methods through high-throughput and data mining*
Gian-Marco RIGNANESE, Université Catholique de Louvain

Communications orales

09:40 *Modélisation des interactions intermoléculaires et relations aux propriétés thermodynamiques des cristaux moléculaires organiques*
Kateryna SYKINA, CRM2, Institut Jean Barriol, Vandoeuvre-lès-Nancy

10:00 *Electrochimie Conceptuelle Ab Initio*
Jean-Sébastien FILHOL, CTMM/ICGM, Montpellier

10:20 *Instabilité du diborane sous haute pression et prédiction d'une nouvelle phase bore-hydrogène BH superconductrice*
Gilles FRAPPER, Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers

10:40 Pause-café

Communication orale invitée

11:10 *Modélisation de la structure de verres de chalcogénures par dynamique moléculaire ab initio et calculs de paramètres RMN*
Eric FURET, Institut des Sciences Chimiques de Rennes

Communications orales

11:50 *Probing the 3d empty states of transition metals using X-ray absorption spectroscopy at the K pre-edge : the contribution of DFT calculations*
Delphine CABARET, Institut de Minéralogie et de Physique des Milieux Condensés, UPMC Paris

12:10 *Application de la DFT aux matériaux pour accumulateurs Li-ion : spectres de perte d'énergie des électrons du silicium amorphe*
Gaël DONVAL, IMN Nantes, LITEN – CEA Grenoble & Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie

12:30 Déjeuner

14:00 **Départ du Site**

Liste des POSTERS

P1	Michèle AMATO , Ecole Polytechnique Palaiseau	89
	<i>Understanding the role of stacking faults in the dielectric response of hexagonal boron nitride</i>	
P2	Ramzi BENCHAMEKH , LPN Marcoussis.....	90
	<i>Fonctions d'onde locales et structure fine de l'exciton dans le formalisme des liaisons fortes</i>	
P3	Khaoula BOUKARI , IS2M Mulhouse	93
	<i>DFT-D study of a single porphyrin adsorption on silicon surface</i>	
P4	Khaoula BOUKARI , IS2M Mulhouse	94
	<i>Atomic scale modelling of supramolecular network on silicon surface</i>	
P5	Khaoula BOUKARI , IS2M Mulhouse	96
	<i>Structural and electronic characterisation of nanostructured silicon surface induced by cobalt atoms</i>	
P6	Paul BOULANGER , Institut Néel Grenoble.....	99
	<i>Assessment of the self-consistent static coulomb-hole plus screened-exchange approximation for organic molecules</i>	
P7	Abed Al Hasan (Abed) BREIDI , Interdisciplinary Centre for Advanced Materials.....	101
	Simulation, Bochum, Germany <i>Ab initio study of topologically close-packed phases (TCP) in Rhenium-based binary alloys</i>	
P8	Yann CLAVEAU , Institut de Physique Rennes.....	103
	<i>Theory Of Ballistic Electron Emission Microscopy</i>	
P9	Thomas DAVIN , Institut Charles Gerhardt Montpellier.....	105
	<i>Fonctionnalisation de liaisons C(sp³)-H d'énolates</i>	
P10	Laure DELFOUR , Institut Néel Grenoble.....	106
	<i>Interaction hydrogène-graphène : DFT & MD</i>	
P11	Thierry DEUTSCH , CEA Grenoble.....	109
	<i>Improving the scaling of the BigDFT electronic structure code</i>	
P12	Nicolas FERNANDEZ , PIIM Marseille	111
	<i>Interaction Be – systèmes π : une étude comparée DFT et méthodes post-HF</i>	
P13	Souraya GOUMRI-SAID , King Abdullah University of Science and technology,	113
	Thuwal, Arabie Saoudite <i>Tailoring optoelectronic properties of graphene using the Buckling</i>	
P14	Ciro A. GUIDO , Ecole Centrale Paris.....	115
	<i>One Third : a new recipe for the PBE0 paradigm</i>	

P15	Antoine JAY , Ecole Polytechnique Versailles	117
	<i>Two new phases of boron carbides designed from first principles</i>	
P16	Claudine KATAN , Institut des Sciences Chimiques Rennes	119
	<i>Absorption à deux photons de chromophores organiques en solution : confronter expériences et calculs TD-DFT</i>	
P17	Salma LAHBABI , CNRS Université de Cergy Pontoise, Noisy-le-Grand.....	121
	<i>Mathematical modeling of materials with defects in a Kohn-Sham model</i>	
P18	Nicolas LESPE , Institut Charles Gerhardt Montpellier	122
	<i>Construction ab initio d'un diagramme de phase potentiel/température : Le cas de l'interface Ru(0001) – eau</i>	
P19	Dongzhe LI , CEA Saclay	125
	<i>Etude Théorique des propriétés magnétiques de nanocristaux</i>	
P20	Laurence MAGAUD , Institut Néel Grenoble	126
	<i>Graphene stacks : a small rotation angle makes the difference</i>	
P21	Alexandre MARTIN , CEA et Energies Alternatives Arpajon	129
	<i>Calcul des constantes élastique en température avec ABINIT</i>	
P22	Cyril MARTINS , CEA et Energies Alternatives Arpajon	131
	<i>Hartree-Fock and hybrid functionals in Abinit : implementation and first applications</i>	
P23	Ayoub NASSOUR , CRM2 Vandoeuvre-lès-Nancy	133
	<i>A theoretical electron density databank using a model of spherical atoms and dummy charges</i>	
P24	Thi Thuong NGUYEN , Institut des Sciences Chimiques Rennes	135
	<i>⁹⁵Mo Nuclear Magnetic Resonance Parameters of [Mo₆X₁₄]²⁻ Clusters</i>	
P25	Tonatiuh RANGEL , CEA/DAM Paris	137
	<i>Implementation of a wavelet-based Projector Augmented-wave method</i>	
P26	Andrés SAUL , CINaM Marseille	139
	<i>Quelques surprises dans les propriétés magnétiques d'oxydes</i>	
P27	Vincent STUTZMANN , CEA Igny	140
	<i>Etude de la courbe de fusion du titane</i>	
P28	François VARCHON , Institut Charles Gerhardt Montpellier.....	143
	<i>Étude en DFT + U de la réactivité électrochimique aux interfaces dans les batteries Li-ion</i>	
P29	Nathalie VAST , Ecole Polytechnique Palaiseau	145
	<i>Fast and accurate calculations of electron energy-loss and inelastic X-Ray scattering cross sections from time-dependent density-functional perturbation theory</i>	

		Mercredi 22	Jeudi 23	Vendredi 24
		09:00 I2_Biermann_Silke	09:00 I6_Chshiev_Mairbek	09:00 I9_Rignanese_Gian-Marco
		09:40 O4_Bieder_Jordan	09:40 O16_Wagner_Philipp	09:40 O25_Sykina_Kateryna
		10:00 O5_Martins_Cyril	10:00 O17_Jobidon_Jean-Francois	10:00 O26_Filhol_Jean-Sebastien
		10:20 O6_Vathonne_Emerson	10:20 O18_Delerue_Christophe	10:20 O27_Frapper_Gilles
		10:40 PAUSE CAFE	10:40 PAUSE CAFE	10:40 PAUSE CAFE
		11:10 I3_Bocquet_Marie-Laure	11:10 I7_Geneste_Gregory	11:10 I10_Furet_Eric
		11:50 O7_Gueddida_Saber	11:50 O19_Cuny_Jerome	11:50 O28_Cabaret_Delphine
		12:10 O8_Ouali_Hela	12:10 O20_Virot_Francois	12:10 O29_Donval_Gael
12:30	Mardi 21	12:30 Déjeuner	12:30 Déjeuner	12:30 Déjeuner
14:00	Accueil des Participants	14:00 I4_Sjakste_Jelena	14:00	14:00 Départ du Site
		14:40 O9_Rocca_Dario	Découverte autour de Guidel et du Pouldu Location Vélo, Canoë/Kayak Randonnée pédestre	
		15:00 O10_Sponza_Lorenzo		
		15:20 O11_Duchemin_Ivan		
		15:40 O12_Even_Jacky		
15:50	PAUSE CAFE	16:00 PAUSE CAFE		
16:20	Introduction (X. Blase)	16:30 I5_Franco_Alejandro	16:30 PAUSE CAFE	
16:30	I1 - Jacquemin Denis	17:10 O13_Baraille_Isabelle	17:00 I8_Sottile_Francesco	
17:10	O1_Costuas_Karine	17:30 O14_Dontot_Leo	17:40 O21_Dinh_Mai	
17:30	O2_Cortona_Pietro	17:50 O15_Hermet_Jessica	18:00 O22_Roedl_Claudia	
17:50	O3_Gontier_David	18:10 Présentation Flash des Posters	18:20 O23_Vallverdu_Germain	
18:10	Présentation Flash des Posters	18:40 Session Poster	18:40 O24_Bruneval_Fabien	
18:40	Session Poster	19:30	19:00 Presentation Transtec/Panasas	
19:30		19:30	19:30 Apéritif offert par Transtec/Panasas	
20:00	Diner	20:00 Diner	20:00 Diner de Gala	