

# Programme Journée Chimie Théorique

**Nuria GALLEGO-PLANAS**



Vendredi 17 mai 2013 à la Faculté des Sciences, Amphi Grignard L003

- 9h00 – 9h20: Accueil des participants
- 9h20 – 9h30: Introduction - **Daniel Schaub** (Directeur Faculté des Sciences) et **Marc Sallé**
- 9h30 – 10h20: **Conférence 1 - Eliseo Ruiz** (Université de Barcelone)  
*Propriétés magnétiques et transport quantique des aimants unimoléculaires sur surfaces: Nuna à Barcelone pendant l'année 2010*
- 10h20 – 10h40: **Com. 1 - Thomas Cauchy**  
*Étude des interactions soufre-soufre intramoléculaires : un stage revisité*
- 10h40 – 11h00: Pause café
- 11h00 – 11h50: **Conférence 2 - Karine Costuas** (Sciences Chimiques, Université de Rennes 1)  
*Revelation of the nature of the photo-activated species thanks to quantum chemical calculations (TDA, TD-DFT) to elucidate luminescent properties or photocatalytic processes*
- 11h50 – 12h10: **Com. 2 - Régis Barillé**  
*Experiments with Self-organizing photochromic material*
- 12h10 – 12h30: **Com. 3 - Piétrick Hudhomme**  
*Salsa moléculaire vue par Nuria !*
- 12h30 – 14h00: Déjeuner (salle de conférences)
- 14h00 – 14h50: **Conférence 3 - Régis Gautier** (Sciences Chimiques, Université de Rennes 1)  
*Contribution théorique à l'étude structurale et spectroscopique de nouveaux composés de l'état solide*
- 14h50 – 15h40: **Conférence 4 - Dorothée Berthomieu** (Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier)  
*Caractérisation de matériaux inorganiques et hybrides par DFT*
- 15h40 – 16h00: **Com. 4 - Maria-Jesus Blesa** (Université de Saragosse)  
*Novel pi-functional systems with NLO properties*
- 16h00 – 16h30: Pause café
- 16h30 – 17h20: **Conférence 5 - Enric Canadell** (Institut de Ciència de Materials de Barcelona (ICMAB-CSIC))  
*Instabilities in Low-Dimensional Metals. First-principles approach*
- 17h20 – 17h40: **Com. 5 - Pierre Frère**  
*Apport des calculs théoriques à l'étude de la structure et des propriétés électroniques des systèmes conjugués*
- 17h40 – 18h00: **Com. 6 - Narcis Avarvari**  
*Donor-Acceptor Systems: a Combined Experimental and Theoretical Study*
- 18h00: Clôture