

# Journées LCPQ 2018 à Clermont-le-Fort

Jeudi 3 Mai

## 9h00 - 10h30 : Equipe MAD

9h00 **E. Posenitskiy** *Excited states with density-functional based tight-binding: Static and dynamical approaches*

9h20 **M. Rapacioli** *Survол des activités de l'équipe MAD*

9h50 **S. Hoyau/F. Bessac** *Adsorption de pesticides par une argile et simulations à l'échelle atomique*

10h10 **C. Dubosq** *Structural and spectroscopic characterization of carbonaceous clusters of astrophysical interest*

## 10h30 - 11h00 : Pause Café

## 11h00 - 12h30 : Equipe PhotoTec

11h00 **M. Boggio-Pasqua** *Survол des activités de l'équipe PhotoTeC*

11h30 **A. Soupert** *Photophysical properties of Ru (II) complexes of N-Heterocyclic Carbenes*

12h00 **I. Dixon** *Exploration de la <sup>3</sup>SEP de complexes de Ru(II) : nouveaux états <sup>3</sup>MC et implications en photoréactivité*

## 12h30 - 14h00 : Déjeuner

## 14h00 - 15h30 : Equipe SEM

14h00 **N. Guihéry** *Survол des activités de l'équipe SEM*

14h18 **M. A. Bouammali** *Y-a-t-il un lien entre le Dzyaloshiski Moriya inverse et les propriétés des matériaux multiferroïques?*

14h36 **H. Bolvin** *Propriétés magnétiques de complexes de lanthanides et d'actinides*

14h54 **C. Martin** *Propriétés spectrales de Sr<sub>2</sub>IrO<sub>4</sub> pure et dopé en électrons*

15h12 **J.-P. Malrieu** *De la tartine à l'éponge ...*

## 15h30 - 16h00 : Pause Café

## 16h00 - 17h30 : Discussions

17h30 - Fin

## Vendredi 4 Mai

### 9h00 - 11h00 : Equipe GMO

9h00 **A. Berger** *An overview of GMO activities*

9h30 **Y. Garniron** *Post-HF methods by stochastic matrix dressing*

10h00 **N. Ben Amor** *Localisation et linear scaling MRCI*

10h20 **P.-F. Loos** *GW, selected CI & quantum Monte Carlo*

10h40 **T. Fleig** *The Role of Electric Dipole Moments of Closed-Shell Atoms in the Search for New Physics*

### 11h00 - 11h30 : Pause Café

**11h30 - 12h00 : David Sanchez** : «Services informatiques offerts au LCPQ et à l'IRSAMC (cloud, sharelatex, etc)»

### 12h00 - 13h30 Déjeuner

### 13h30 - 15h00 : Discussions

### 15h00 - Fin