

Réunion générale du GDR CORREL, 27-29 Novembre 2013, Paris

UPMC, Campus Jussieu, Bâtiment Esclangon, Amphi Durand

<http://gdrcorelec.ups-tlse.fr>



méthodes corrélées pour la structure électronique

Mercredi 27 novembre

Animateur : Andreas Savin

9:00-10:30 Evert Jan Baerends (Amsterdam Netherlands & Pohang South Korea), *Perspectives on density-functional theory and density-matrix functional theory*

10:30-10:45 Pause café + montage des posters (Caves Esclangon)

Animateur : Michel Caffarel

10:45-12:15 Garnet Chan (Princeton USA), *Perspectives on strongly correlated electrons*

12:15-14:15 Déjeuner : Buffet (Caves Esclangon)

Animateur : Chantal Daniel

14:15-15:45 Jürgen Gauss (Mainz Germany), *Perspectives on coupled-cluster methods*

15:45-16:00 Pause café (Caves Esclangon)

Animateur : Peter Reinhardt

16:00-17:30 Christian Ochsenfeld (Munich Germany), *Perspectives on correlated linear-scaling methods*

19:30 Dîner à La Coupole (pour les personnes inscrites)

Jeudi 28 novembre

Chair : Julien Toulouse

9:00-9:25 Jean-Paul Malrieu (Toulouse), *A multi-state multi-reference coupled cluster formalism*

9:25-9:50 Emmanuel Giner (Toulouse), *Fonctions d'onde multi-déterminantales sélectionnées pour les calculs Monte Carlo quantique*

9:50-10:15 Mario Dagrada (IMPMC Paris), *Quantum Monte Carlo study of protonated water dimer*

10:30-10:45 Pause café (Caves Esclangon)

Chair : Carlo Adamo

10:45-11:10 Daniel Borgis (ENS Paris), *Liens entre DFT quantique et classique et le problème de la corrélation en DFT classique*

11:10-11:35 Noura Khemiri (Carthage Tunisie), *Etude DFT et multi configurationnelle de la spectroscopie et de la fragmentation du cation de la benzophénone*

11:35-12:00 Asma Marzouk (LADIR Paris), *L'approche Broken Symmetry dans le formalisme UDFT : prise en compte de la corrélation statique*

12:00-14:00 Déjeuner : L'Ardoise (Campus Jussieu, près de la tour 25)

Réunion du bureau du GDR pendant le déjeuner

Chair : Emmanuel Fromager

14:00-14:25 Dario Rocca (CRM2 Nancy), *Random-phase approximation correlation energies from Lanczos chains and an optimal basis set: Theory and applications to the benzene dimer*

14:25-14:50 Bastien Mussard (CRM2 Nancy), *Analytical gradients of random phase approximation correlation energies in range-separated-hybrid context: Theory and implementation*

14:50-15:15 Elisa Rebolini (LCT Paris), *Noyau de corrélation Bethe-Salpeter dépendant de la fréquence pour le calcul des énergies d'excitation en TDDFT*

15:15-17:00 Posters + café (Caves Esclangon)

Chair : Nadia Ben Amor

17:00-17:25 Alexandrina Stoyanova (Strasbourg / Dresden Germany), *On the combination of range-separated density-functional perturbation theory with optimized effective potential techniques*

17:25-17:50 Odile Franck (Strasbourg / LCT Paris), *Connexion adiabatique généralisée pour un ensemble d'états excités partiellement occupés : exemple de H₂*

17:50-18:15 Lucas Baguet (LPTMC Paris), *Diagramme de phase Hartree-Fock du gaz d'électrons homogène à 2 et 3 dimensions*

Vendredi 29 novembre

Chair : Paola Nava

9:00-9:25 Matthieu Saubanère (Kassel Germany / Montpellier), *Numerical correlation-energy functional for lattice density-functional theory: A systematic approach to the ground-state properties of strongly correlated systems*

9:25-9:50 Andre Gomes (Lille), *Towards systematically improvable models for heavy elements in condensed phase with frozen density embedding*

9:50-10:15 Antoine Marion (SRSMC Nancy), *An improved description of solute-solvent interactions for semiempirical (NDDO) Born-Oppenheimer molecular dynamics of biomolecular systems*

10:30-10:45 Pause café (Hall Esclangon)

Chair : Michele Casula

10:45-11:10 Bernard Amadon (CEA Paris), *Calculation of screened coulomb interaction in strongly correlated electron solids*

11:10-11:35 Thomas Ayrat (Ecole Polytechnique/CEA Paris), *Local and nonlocal correlations in strongly correlated systems: Insights into two-dimensional systems of adatoms on surfaces from self-consistently combined GW and dynamical mean field theory*

11:35-12:00 Giovanna Lani (Ecole Polytechnique Paris / Jülich Germany), *Determination of the One-particle Green's Function: Freedom and Constraints*

12:00-12:25 Vita Ilakovac (LCPMR Paris), *Spins and charges in Sr14Cu24O41*

- Logins et mots de passe **wifi** individuels pour personnels extérieurs à l'UPMC dans vos badges.

- Les **posters** peuvent être affichés dans les caves du bâtiment Esclangon dès mercredi matin. Ils doivent être enlevés jeudi soir.

- **Déjeuners** (pour tous les participants avec badges) :

Mercredi 27 novembre de 12h15 à 14h15 : Buffet dans les caves du Bâtiment Esclangon.

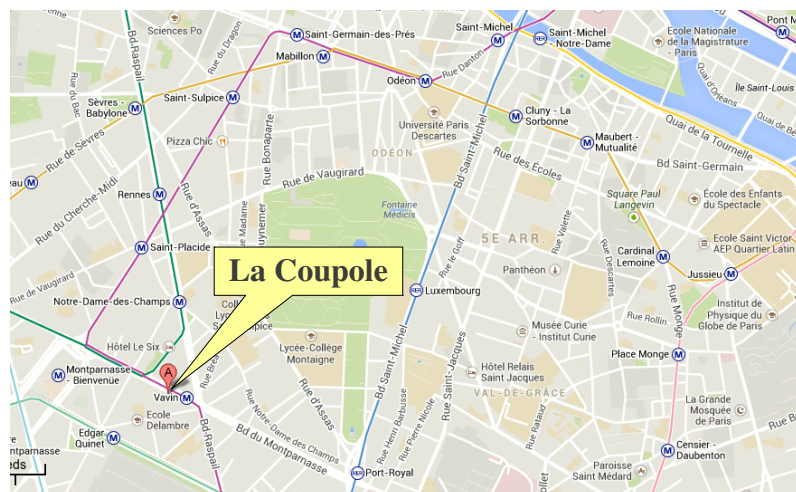
Jeudi 28 novembre de 12h à 14h : Restaurant L'Ardoise, Campus Jussieu, près de la tour 25 :



Dîner le mercredi 27 novembre à 19h30 (pour les personnes inscrites, vérifiez sur vos badges) :

La Coupole, 102 Boulevard du Montparnasse, 75014 Paris (Metro *Vavin* ou *Edgar Quinet* ou *Montparnasse-Bienvenue* ou RER B *Port-Royal*). +33 (0)1 43 20 14 20

Depuis *Jussieu* : prendre Metro ligne 10 (direction *Boulogne - Pont de Saint-Cloud*) jusqu'à *Odéon*, puis ligne 4 (direction *Mairie de Montrouge*) jusqu'à *Vavin*.



Réunion soutenue par :

