Réunion générale du GdR-CORREL
Corrélation Électronique
Marseille – 8-10 Juillet 2015

Campus St-Charles
Amphi de Sciences Naturelles

GDR CORREL
méthodes corrélées pour la structure électronique

iSm2 Institut des Sciences Moléculaires de Marseille UMR 7313

Réseau Français de Chimie Théorique

cnrs INC

SCF Société Chimique de France

Fédération ChiMie Marseille

Programme

MERCREDI, 8 JUILLET

8:30	Accueil des participants (Amphi Sc.Nat.)
8:55	Ouverture
	Y. Carissan
9:00 - 10:30	**Pr. Willem Klopper** *Overview on explicitly correlated methods*
10:30 - 11:00	Pause café – Installation des posters (salles C1 et C2)
	J.-P. Malrieu
11:00 - 11:20	**Denis Hagebaum-Reignier** *Stability and bonding in the ground and excited states of lithium fluoride Li_nF clusters*
11:20 - 11:40	**Anthony Scemama** *A convenient issue to the multiple parentage problem: test of a MRCC method and prospects*
11:40 - 12:00	**Emmanuel Giner** *Spin density and metal-ligand delocalization: some insight from wave function theory*
12:00 - 14:00	Pause déjeuner (salles C1 et C2)
	M. Caffarel
14:00 - 15:30	**Pr. Cyrus Umrigar** *Overview on QMC methods*
15:30 - 16:30	Pause café – Session posters (salles C1 et C2)
	P. Nava
16:30 - 16:50	**Roland Assaraf** *Computing physical properties in quantum Monte Carlo with statistical fluctuations independent of system size*
16:50 - 17:10	**Félix Mouhat** *Fully quantum dynamics of proton transfer in aqueous systems: the case study of the Zundel ion*
17:10 - 17:30	**Ayadi Sameh** *Etude théorique de réactions d'epoxydation des monoterpènes: myrcène et ocimène*

JEUDI, 9 JUILLET

8:30	Accueil des participants
	J. Toulouse
9:00 - 10:30	**Pr. Trygve Helgaker** *Fundamentals of DFT*
10:30 - 11:00	Pause café
	E. Fromager
11:00 - 11:20	**Elisa Rebolini** *Time-independent range-separated density functional theory for molecular excitation energies*
11:20 - 11:40	**Emanuele Coccia** *Time-dependent configuration interaction for high-harmonic generation*
11:40 - 12:00	**Bastien Mussard** *Range-Separated Random Phase Approximations*
12:00 - 14:00	Pause déjeuner
	M. Casula
14:00 - 15:30	**Dr. Xavier Blase** *Green functions and beyond*
15:30 - 16:30	Pause café – Session posters
	P. Reinhardt
16:30 - 16:50	**Saber Gueddida** *Un algorithme GW de complexité O($N^3 N_{Brillouin}$) pour les cristaux organiques*
16:50 - 17:10	**Claudio Attaccalite** *Nonlinear reponse of solids within the GW plus Bethe Salpeter approximation: application to second- and third-harmonic generation*
17:10 - 17:30	**Patrick Cassam-Chenaï** *Electron correlation versus electron-nucleus correlation*
20:00	Dîner : Restaurant "Les Arcenaulx" 25 Cours Honoré d'Estienne d'Orves, 13001 Marseille

VENDREDI, 10 JUILLET

8:30	Accueil des participants

D. Hagebaum-Reginier

9:00 - 9:20	**Arjan Berger** *Fully parameter-free calculation of optical spectra for insulators, semiconductors and metals from a simple polarization functional*
9:20 - 9:40	**Nathaniel Raimbault** *Gauge-Invariant Calculation of Static and Dynamical Magnetic Properties from Current Density*
9:40 - 10:00	**Odile Franck** *Convergence en base de la théorie de la fonctionelle de la densité avec séparation de portée*
10:00 - 10:30	Pause café – Retrait des posters

S. Humbel

10:30 - 11:00	**Michel Caffarel** *Bilan des activités du GdR-CORREL et perspectives*
11:00 - 11:20	**Lorenzo Ugo Ancarani** *A Sturmian Approach to Structure and Ionization Processes of Atoms and Molecules*
11:20 - 11:40	**Patricia Guevara** *Étude des vibrations intermoléculaires et intramoléculaires de l'indène et de ses analogues hétérocyclés*
11:40 - 12:00	**Roberto A. Boto** *On the topology of the reduced density gradient*
12:00	Clôture