

Simulations (and theory) in Physical chemistRy: an International Kermesse in Paris

28 et 29 mai (1 jour et demi) au département de chimie de l'ENS

Rodolphe Vuilleumier
PASTEUR, Département de chimie, École normale supérieure, PSL Research University,
Sorbonne Université, CNRS, 75005 Paris, France
Rodolphe.vuilleumier@ens.fr

Marie-Pierre GaiGeot
Université d'Evry
mgaigeot@univ-evry.fr

Marialore Sulpizi
University of Mainz
sulpizi@uni-mainz.de

1. Proposition

1.1 Motivation et objectifs

La motivation principale de ce workshop est de célébrer le 65^{ème} anniversaire de Michiel Sprik.

Michiel Sprik a participé à de nombreux développements concernant la simulation de phénomènes physico-chimiques en phase condensée. Ceci inclut les premiers développements de champs de force polarisables, de calculs d'intégrales de chemin d'un électron solvate dans NH₃. Il a aussi développé des méthodes d'accélération de la dynamique pour vaincre le problème d'échelles de temps en simulations, par la méthode dite Blue Moon. Il est cependant le plus connu pour ses apports à la dynamique moléculaire ab initio, à commencer par les premières simulations ab initio de l'eau liquide et des solutions aqueuses. Aujourd'hui, il mène des développements importants en électrochimie par dynamique moléculaire ab initio.

Dans ce workshop, nous proposons donc, à travers des présentations de personnalités ayant travaillé avec Michiel Sprik, de (re)-découvrir l'étendue des domaines abordés par la simulation moléculaire. Nous profiterons alors de cette occasion pour discuter du futur de ces simulations, tant au plan des applications que des développements théoriques à venir

1.2 Liste des participants

Participants ayant déjà accepté

Michiel Sprik (ms284@cam.ac.uk)

Ali Alavi (asa10@cam.ac.uk)

Regla Ayala (rae@us.es)

Jochen Blumberger (j.blumberger@ucl.ac.uk)

Jun Cheng (chengjun@xmu.edu.cn)

Giovanni Ciccotti (giovanni.ciccotti@roma1.infn.it)

Daan Frenkel (df246@cam.ac.uk)

Jean-Pierre Hansen (jph32@cam.ac.uk)

Patricia Hunt (p.hunt@imperial.ac.uk)

Juerg Hutter (hutter@chem.uzh.ch)

Mike Klein (mlklein@temple.edu)

Kari Laaksonen (kari.laaksonen@aalto.fi)

Evert Jan Meijer (E.J.Meijer@uva.nl)

Yoshitaka Tateyama (TATEYAMA.Yoshitaka@nims.go.jp)

Ivano Tavernelli (ITA@zurich.ibm.com)

Mark Tuckerman (mark.tuckerman@nyu.edu)
Joost Vandevondele (joost.vandevondele@cscs.ch)
Chao Zhang (chao.zhang@kemi.uu.se)

Autres participants contactés

Wanda Andreoni
Michele Parrinello
Ursula Roethlisberger

De la place pour quelques participants locaux est aussi prévue.

2. Support Financier

Nous sollicitons une participation de 2000 € pour les pauses et le diner du lundi soir et quelques hébergements.