

Avancées récentes à l'interface Mathématiques-Chimie

Andreea GRIGORIU-LACHAPELLE, LJLL; Université Paris Diderot

Yvon MADAY, LJLL; UPMC, IUF et Brown University

Benjamin STAMM, LJLL; UPMC et CNRS

L'objectif de ce minisymposium est de présenter des contributions mathématiques récentes et des problèmes ouverts pour la simulation de modèles issus de la chimie computationnelle. Les intervenants sont des mathématiciens, des chimistes et des industriels et les exposés sont centrés sur deux domaines précis: le premier relevant de molécules en milieux solvant et l'autre sur la modélisation de mémoires vives de nouvelles générations.

Les intervenant dans ce mini-symposium sont:

- o Benjamin Stamm (Laboratoire Jacques-Louis Lions, CNRS et UPMC):
Fast domain decomposition methods for Continuum Solvation: theoretical foundation of the algorithm
- o Filippo Lipparini (Institut du calcul et de la simulation, UPMC):
Fast domain decomposition methods for Continuum Solvation: efficient and parallel implementation
- o Jean Philip Piquemal (Laboratoire de Chimie Théorique, UPMC):
Improving the scaling of new generation molecular dynamics classical simulations: a dialog between Mathematics and Theoretical Chemistry
- o Pierre Dorion (CEA-LETI Grenoble):
Simulation of CBRAM devices with the level set method
- o Boubacar Traore (CEA-LETI Grenoble):
HfO2 based RRAM: Insight from experiment and ab-initio calculations
- o Dr. Frank von Horsten (Atotech Deutschland GmbH):
Modeling in the Electronics Industry: The role of Pd in electroless copper deposition

Andreea GRIGORIU-LACHAPELLE, UFR de Mathématiques, Université Paris-Diderot, Bâtiment Sophie Germain, 75013 Paris

grigoriu@math.univ-paris-diderot.fr

Yvon MADAY, LJLL, UPMC, Boîte courrier 187, 75252 Paris

maday@ann.jussieu.fr

Benjamin STAMM, LJLL, UPMC, Boîte courrier 187, 75252 Paris

stamm@ann.jussieu.fr