

XIIIe journées nat. de radiochimie et de chimie nucléaire

vendredi 5 octobre 2012

Session C Apport des différents outils de modélisation de chimie quantique (14:00 - 15:40)

time	[id] title	presenter
14:00	[23] Development and application of a polarizable force-field for actinides in aqueous solution including cooperative charge-transfer terms	Dr RÉAL, F.
14:25	[24] Modélisation de l'adsorption de l'ion uranyle aux interfaces eau / TiO ₂ et eau / NiO par dynamique moléculaires ab initio	Dr ROQUES, J.
14:50	[25] Modélisation des propriétés métalliques d'un halogène, l'astate	Dr AYED, T.
15:15	[26] Molecular modeling of the swelling properties and interlayer structure of Cs and K-Montmorillonites : Effects of charge distribution in the clay layers	M. NGOUANA WAKOU, B.