

Programme – GERM 2015

Dimanche 10 Mai		
18h00 – 19h00	Accueil	
19h00 – 19h30	M. Blackledge	NMR studies of protein motions on multiple timescales – from fundamental biophysics TO functional dynamics
19h30 – 20h00	T. Charpentier	Propagating the density matrix : a review of methods for Solid State NMR applications
20h00 – 20h15	Questions	
20h15 – 20h45	Apéritif de Bienvenue	
21h	Diner	

Lundi 11 Mai		
Modélisation de Structure		
8h30 – 9h10	M. Nilges	Structure calculation methods for solution and solid-state NMR
9h10 – 9h30	F. Paquet	Modèle atypique de compaction de l'ADN par la protéine architecturale MC1 chez les Euryachées résolu par RMN
9h30 – 9h50	A. Abyzov	L'étude « model-free » de la dynamique des protéines intrinsèquement désordonnées
9h50 – 10h10	H. Déméné	Structure et dynamique de la protéine P1 du virus RYMV
10h10 – 10h30	Pause Café	
10h30 – 11h10	C. J. Pickard	First principles methods for the prediction of spectra and structure : GIPAW and AIRSS
11h10 – 11h30	E. Furet	Modélisation de verres de chalcogénures par dynamique moléculaire et RMN de l'état solide
11h30 – 11h50	P. Thureau	Dynamic nuclear polarization for the investigation of powders at natural isotopic abundance
11h50 – 12h10	A. Gansmüller	Structure and dynamics of confined nanodrugs. A joint NMR and total X-ray scattering study
12h10 – 12h30	J. V. Hanna	A Multinuclear Solid State NMR and GIPAW DFT Approach Towards the Evaluation of the Proposed Structural Motifs of Vaterite
12h30 – 14h00	Repas	
14h00 – 16h00	Session Poster I	
Dynamique de Spin I		
16h00 – 16h40	M. H. Levitt	SpinDynamica: Simulating Magnetic Resonance in Mathematica
16h40 – 17h00	B. Gouilleux	Simulations numériques en RMN 2D ultrarapide : optimisation de la modulation-J et amélioration de la sensibilité
17h00 – 17h20	D. S. Grebenkov	A matrix formalism: an efficient numerical tool for diffusion NMR
17h20 – 17h40	K. Machado	Chimie des Bains pour l'Electrolyse de l'Aluminium: Etude par RMN Haute Température et Modélisation

17h40 – 18h00	R. Nemausat	Résonance Magnétique Nucléaire : sonde des fluctuations thermiques quantiques
18h00 – 18h20	B. Plainchont	Expériences RMN sous encodage spatial fréquentiel : Description théorique du phénomène par la simulation
18h20 – 19h00	T. Vosegaard	Numerical simulations in solid-state NMR - Answering questions on structure and dynamics
19h00	Diner	

Mardi 12 Mai		
IRM		
8h30 – 9h10	H. St-Jalmes	Des objets-tests physiques aux objets virtuels pour l'Imagerie par Résonance Magnétique
9h10 – 9h30	G. Tastevin	Dynamique RMN dans les liquides à forte aimantation
9h30 – 9h50	J. M. Bonny	Apport de la modélisation pour une quantification plus précise de la densité de noyaux par IRM
9h50 – 10h30	J. R. Li	Numerical simulation and macroscopic model formulation for diffusion magnetic resonance imaging in the brain
10h30 – 10h50	Pause Café	
Dynamique de spin II		
10h50 – 11h10	T. Bamine	Calculs et compréhension des shifts de contacts de Fermi pour des phosphates de métaux de transition appliqués aux batteries Li-ion. Cas particulier de la compréhension des défauts dans LiVPO4F.
11h10 – 11h30	H. Chemmi	Transport hydrique multi-échelles dans des pâtes de ciment durcies et des silices poreuses de référence
11h30 – 11h50	S. Kroeker	Expanding the NMR palette: multinuclear magnetic resonance of disordered coordination polymers
11h50 – 12h10	P. Berruyer	Three-Dimensional Structure Determination of Surface Species by DNP Enhanced Solid-state NMR
12h10 – 12h30	J. Hirschinger	Analytical descriptions of cross-polarization dynamics : relaxing the secular approximations
12h30 – 14h00	Repas	
14h00 – 16h00	Session Poster II	
Hardware		
16h00 – 16h40	D. Sakellariou	Miniature magnets for NMR and MRI applications
16h40 – 17h00	E. Nativel	Evanescent Waves Nuclear Magnetic Resonance
17h00 – 17h20	P. J. Nacher	IRM sans gradients (TRASE) à bas champ avec de l' ³ He hyperpolarisé
17h20 – 17h40	C. Coillot	Modèle d'homogénéité d'une antenne solénoïde pour l'étude par IRM des traumatismes de la moelle épinière.
17h40 – 18h00	B. Dillmann	Simulation électromagnétique et analyse fréquentielle de filtres
18h00 – 18h40	G. Ferrand	Simuler des antennes réseaux pour l'IRM de la tête humaine à ultra haut-champ ($\geq 7T$) : performance des antennes et sécurité du patient.
19h00	Apéritif Sètois - Diner	

Mercredi 13 Mai		
Calculs de Paramètres		
8h30 – 9h10	F. Fayon	Calculs DFT de paramètres RMN par la méthode GIPAW : application aux solides inorganiques cristallins ou désordonnés
9h10 – 9h30	J.-P. Dognon	Understanding a Host-Guest Model System through ¹²⁹ Xe NMR Experiments and Theoretical Chemistry
9h30 – 9h50	C. Gervais	Caractérisation par RMN d'interfaces hybrides : approche combinée entre expériences et calculs ab-initio
9h50 – 10h10	H. Colaux	Méthode numérique pour l'obtention d'impulsions composites FAM-N pour l'amélioration du signal des expériences MQMAS
10h10 – 10h30	Pause Café	
10h30 – 10h50	D. Petit	Dynamique Multi-échelles de Liquides Ioniques libres et Confinés pour les Batteries aux Lithium
10h50 – 11h10	L. Joubert	Apport de la chimie quantique à l'étude expérimentale RMN du comportement dynamique d'agrégats d'alkyle lithium
11h10 – 11h50	P. Schanda	Protein Dynamics Studied by Solid-State NMR: From Functional Dynamics in Large Enzymes to Overall Motion in Crystals
11h50	Conclusion	