

Benjamin Rotenberg
né le 14 février 1982 à Paris, marié
ResearcherID : C-5490-2014 / ORCID : 0000-0001-5198-4650

Laboratoire PHENIX, Sorbonne Université
4 pl. Jussieu, 75005 Paris
benjamin.rotenberg@sorbonne-universite.fr

Situation actuelle

Directeur de Recherche CNRS en section 13 (Chimie Physique, théorique, analytique)

Laboratoire Physicochimie des électrolytes, et nanosystèmes interfaciaux - UMR 8234 CNRS Sorbonne Université.

Thème de recherche : modélisation multi-échelles interfaces, en particulier chargées.

Mots clés : simulations moléculaires et mésoscopiques, coarse-graining, phénomènes électrocinétiques, milieux poreux chargés, nanofluidique, argiles, supercondensateurs, énergie bleue

Formation

2012 Habilitation à Diriger des Recherches

Physicochimie des interfaces chargées : modélisation multi-échelles et applications pour l'énergie

2004 – 2007 Thèse *Modélisation multi-échelle du comportement de l'eau et des ions dans les argiles*

sous la direction de Pierre Turq à l'Université Pierre et Marie Curie financement de l'Andra.

2003 – 2004 DEA en Matière Condensée : Chimie et Organisation, UPMC (Très Bien, rang 1^{er})

2001 – 2005 Cours de chimie à l'**École Normale Supérieure** (Paris)

Expérience professionnelle

(Co-)direction de 7 thèses, co-encadrement de 4 autres thèses et 3 post-docs, encadrement de M2 et L3.

Depuis 2018 Directeur de Recherche CNRS

2018 Visiting Researcher au Helmholtz-Zentrum Berlin (Allemagne), dans le groupe de Joachim Dzubiella.

2010 & 2011 Professeur invité à l'Université de Barcelone (Espagne), dans le groupe d'Ignacio Pagonabarraga.

2010, 2011 & 2013 Visiting Scholar à l'Université de Berkeley, Californie (USA), dans le groupe de David Chandler.

2008 – 2018 Chargé de Recherche CNRS (CR2, puis CR1 en 2013) Laboratoire PECSA, PHENIX depuis 2014.

2007 – 2008 Post-doc à l'institut AMOLF, Amsterdam (Pays-Bas), avec Daan Frenkel.

2004 – 2007 Thèse au Laboratoire Liquides Ioniques et Interfaces Chargées sous la direction de Pierre Turq.

2004 Max-Planck-Institut für Kolloid- und Grenzflächenforschung, Golm (Allemagne), avec Markus Antonietti.

2003 Laboratoire Colloïdes et Matériaux Divisés, ESPCI, avec Jérôme Bibette.

2003 Department of theoretical chemistry, Cambridge (Royaume-Uni), avec Jean-Pierre Hansen.

Distinctions

2018 HPCwire Readers' & Editors' Choice (best use of High Performance Computing in Energy)

2017 Friedrich-Wilhelm Bessel Research Award de la **Alexander von Humboldt Foundation** (Allemagne).

2015 Médaille de Bronze du CNRS.

2014 Sélectionné par la New York Academy of Sciences pour participer au **Science and Technology in Society (STS) Forum**, Kyoto, dans le cadre du « Future Leaders program ».

2013-2018 Membre Distingué Junior de la Société Chimique de France.

2013 Grand Prix Michel Guillaud Schlumberger de l'Académie des Sciences.

2013 Co-lauréat du **Prix La Recherche 2013**, mention « Physique ».

2013 Prix Jeune Chercheur de la Division de Chimie Physique (commune à la SCF et la SFP).

2012-2017 Prime d'Excellence Scientifique du CNRS.

2011 Young Faculty poster prize, **Mini Statistical Mechanics Meeting** (Berkeley, Californie, USA).

2007 Co-lauréat du **Prix La Recherche 2007**, mention « Énergie ».

2007 Student travel grant au 44th **Annual Meeting of the Clay Minerals Society** (Santa-Fe, USA).

2001 Admis à l'**École Normale Supérieure** (Paris, rang 1^{er}) et à l'**École Polytechnique** (1^{er}).

2000 Médaille de bronze aux **Olympiades Internationales de Chimie** (Copenhague, Danemark).

Enseignement

2018 Ecole internationale SJSACMS (Bangalore, Inde) : mesoscopic hydrodynamics, Lattice-Boltzmann (doct.).

Depuis 2015 Ecole internationale PISACMS (Paris) : mesoscopic hydrodynamics, Lattice-Boltzmann (M2/doct.).

2015 Ecole MeMoSim (Lyon) : méthodes probabilistes pour systèmes complexes (DCP, ANF CNRS).

Depuis 2015 Master Chimie Physique Analytique et Théorique (UPMC) : modélisation de la solvatation (M1).

2010 & 2011 Master in Computational Physics (Barcelone) : modélisation multi-échelle (M2).

Depuis 2009 Master Chimie Physique Analytique et Théorique (UPMC) : modélisation multi-échelle (M2).

2009 – 2017 International Master in Advanced Clay Science (Poitiers) : modélisation moléculaire (M1).

2005 – 2007 Moniteur en Chimie (UPMC).

Examinateur Oral de chimie au concours d'entrée à l'ENS (2012-2014)

Interrogateur en physique en PC* au lycée Louis-le-Grand (2004)

Membre de jury ou rapporteur Master (Poitiers, Paris), **10 Thèses** (Orsay, Pau, Paris, Cambridge, Marne-la-Vallée, Grenoble) et **4 HDR** (Paris, Lyon, Nantes, Prague)

Partenariats et financement de projets

H2020 *Coordinateur adjoint* du réseau européen **ETN NANOTRANS** (total 3.9M€, 2016-2020)

Principal Investigator du réseau européen **FET-OPEN NANOPHLOW** (total 3.3M€, 2018-2021)

Participant à l'action **COST NMR Relaxometry** (2016-2020)

FP7 *Membre associé* des réseaux européens **ITN COMPLOIDS** (2009-13) et **Euratom CATCLAY** (2010-14)

RS2E *Membre* du Réseau sur le Stockage Electrochimique de l'Energie

ANR *Principal Investigator* du projet ANR-DFG NEPTUNE (2017-21) – 390k€

Porteur du projet JCJC LENNS (2015-19) – 180k€

Co-direction avec Pierre Turq du projet SIMISOL (2009-12) – 300k€

Partenaire des projets MAICANANO (2010-13) et CELADYCT (2012-16)

Ville de Paris *Porteur* du projet Emergence(s) "Energie bleue et désalinisation" (2016-19) – 250k€

IFP-En Thèses d'Alexandru Botan (2008-2011) et Pauline Simonnin (2014-2017) – 200k€

Andra Post-doc de Magali Duvail (2010-11) et thèse d'Amaël Obliger (2011-14) – 175k€

DIM Oxymore de la Région Ile-de-France, avec Anne Boutin : thèse de Wilfried Louisfremea (2013-16) – 100k€

France-Berkeley Fund *Principal Investigator* avec David Chandler (2012-13) – 10k\$

Principal Investigator avec David Limmer (2018-19) – 11k\$

GNR PARIS *Porteur* d'un projet (2010-11) – 3.5k€

GENCI *Porteur* de projets – 6 millions (2016) et 1,8 millions (2017) d'heures de calcul sur Curie ; 600.000 heures sur Curie et 700.000 heures sur Irene (2017) ; 2.000.000 heures sur Occigen (2018)

Administration de la recherche

Programme NEEDS (Nucléaire : Energie, Environnement, Déchets, Société) du CNRS : co-direction du Projet Fédérateur "Milieux Poreux" depuis 2012.

Laboratoire PHENIX (et PECSA) Co-responsable de l'équipe Modélisation et Expériences Multi-échelles depuis 2019, responsable du site web (www.phenix.cnrs.fr) depuis 2009, CSSI (Correspondant de Sécurité des Systèmes d'Information) depuis 2013, organisation des séminaires. Ancien membre du conseil de l'UMR [2009-2010].

Chargé de mission UPMC (vice-présidence recherche et innovation) sur la participation de l'UPMC au programme européen JOPRAD "Toward a joint programming on radioactive waste disposal" depuis 2016.

Faculté de Chimie de l'UPMC (UFR 926) Membre élu du conseil et du conseil scientifique, membre nommé de la commission des personnels IATOS [2009-2013].

Groupe d'experts de la 31^e section du CNU à l'UPMC (Comités de sélection Maître de Conférences et ATER).

Comité de pilotage de l'axe transversal "Modélisation Multi-échelle" du Labex MATISSE. Membre [2011-2017], co-animateur [2015-2017].

Comité de pilotage du groupement de laboratoires "Transferts" de l'Andra [2009-2014].

Evaluateur de projets soumis à : ERC, ANR, PRACE (HPC Europe), Swiss National Science Foundation (Suisse), Netherlands Organisation for Scientific Research NWO et Technology Foundation STW (Pays-Bas), Foundation for Polish Science FNP (Pologne), Croatian Science Foundation (Croatie), Programme Emergences (Ville de Paris), Labex Chammatt, I-SITE E2S, Comité ECOS Nord.

Animation scientifique

Membre de l'Editorial Board de *Molecular Physics* et guest editor de 3 volumes de cette revue.

Reviewer (~20/an) pour *Nature Commun.*, *Nature Phys.*, *PNAS*, *Phys. Rev. Lett.*, *Phys. Rev. X*, *J. Phys. Chem. Lett.*, *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem.*, *J. Chem. Theory Comput.*, *Soft Matter*, *ACS Nano*, *Sci. Rep.*, *Langmuir*, *Europhys. Lett.*, *Nanolett.*, *J. Power Sources*, *Mol. Phys.*, *J. Coll. Interf. Sci.*, *Phys. Rev. E*, *J. Phys. Condens. Matter*, *Geochim. Cosmochim. Acta*, *Oil & Gas Sci. Technol.*, *Int. J. Greenh. Gas Control*, *Adv. Water Resour.*, ...

Membre du bureau de la sub-division *Modélisation et Simulation* et **membre du Conseil** de la *Division de Chimie Physique* commune à la Société Chimique de France et à la Société Française de Physique [2015-2018].

Organisation de conférences

Avril 2018 CECAM Workshop *Phoretic effects at the nanoscale* à Lausanne, Suisse

Mars 2018 CECAM Workshop *Electrostatics in Concentrated Electrolytes* à Lausanne, Suisse

Juin 2017 CECAM School *Transport of soft matter at the nanoscale* à Mainz, Allemagne

Avril 2017 CECAM Workshop *Exploiting finite-size effects in simulations*, Paris

Décembre 2016 Workshop annuel du *GDR Multiscale Materials Under the Nanoscope (M2UN)*

Décembre 2016 Journées annuelles de *NEEDS - Milieux Poreux*

Juillet 2016 CECAM-FR-MOSER Discussion Meeting *Algorithms and codes for the simulation of explicit electrodes*

Décembre 2015 Journées annuelles de *NEEDS - Milieux Poreux*

Juin 2015 Comité Scientifique de *LowPerm2015* à Rueil-Malmaison.

Mai 2015 CECAM Workshop *Simulation of systems under thermodynamic-like gradients* à Saragosse, Espagne.

Décembre 2014 Journées annuelles de *NEEDS - Milieux Poreux*

Octobre 2014 Premier Colloque *NEEDS*, Nantes.

Août 2014 CECAM Workshop *Modelling ionic liquids at electrochemical interfaces* à Paris.

Juillet 2014 Meeting en l'honneur de Pierre Turq à Paris.

Mars 2014 CFCAM Discussion Meeting *Simulation of systems under thermodynamic gradients* à Paris.

Décembre 2013 Meeting en l'honneur de Jean-Pierre Hansen à Paris.

Novembre 2013 Journées annuelles de *NEEDS - Milieux Poreux* à Paris.

Septembre 2013 CFCAM Discussion Meeting, *Modelling ionic liquids at electrochemical interfaces* à Paris

Décembre 2012 Colloque de lancement du programme *NEEDS - Milieux Poreux* à Paris.

Octobre 2012 Session Molecular Modelling au *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"* à Montpellier.

Juin 2011 CECAM Workshop *Microscopic-Scale View of CO₂ Sequestration* à Lausanne, Suisse.

Mai 2011 CECAM Workshop *New Challenges for the Simulation of Electrokinetic Phenomena* à Paris.

Publications et communications

106 articles dont 1 *Nature Materials*, 2 *Nature Communications*, 1 *Nature Energy*, 1 *ACS Nano*, 2 *JACS*, 1 *Phys. Rev. X*, 4 *Phys. Rev. Lett.*, 1 *ACS Cent. Sci.*, 2 *J. Phys. Chem. Lett.* (dont 1 perspective), 1 *J. Chem. Theory Comput.*, 1 *Soft Matter*, 1 *Faraday Discussion* (cover), 18 *J. Phys. Chem. B&C* (dont 1 cover), 13 *J. Chem. Phys.*, 4 *PCCP* (dont 2 perspectives), 3 *Geochim. Cosmochim. Acta*

7 actes de congrès avec comité de lecture

5 chapitres d'ouvrages

34 conférences invitées (dont 4 keynotes)

14 autres communications orales et **17 posters** à des conférences

33 séminaires invités et **18 autres communications**

Liste des publications

REVUES INTERNATIONALES AVEC COMITÉ DE LECTURE

- [1] B. Rotenberg, R. Taïeb, V. Véniard et A. Maquet, H_2^+ in intense laser field pulses : ionization versus dissociation within moving nuclei simulations, *J. Phys. B* **35**, L397-L402 (2002).
- [2] A. Moncho-Jorda, B. Rotenberg et A.A. Louis, Effect of polymer-polymer interactions on the surface tension of colloid-polymer mixtures, *J. Chem. Phys.* **119**, 12667-12672 (2003).
- [3] B. Rotenberg, J. Dzubiella, J.-P. Hansen et A.A. Louis, Thermodynamic perturbation theory of the phase behavior of colloid / interacting polymer mixtures, *Mol. Phys.* **102**, 1-11 (2004).
- [4] V. Krakoviack, B. Rotenberg et J.-P. Hansen, An integral equation approach to effective interactions between polymers in solution, *J. Phys. Chem. B* **108**, 6697-6706 (2004).
- [5] S. Mandal, N. Lequeux, B. Rotenberg, M. Tramier, J. Fattaccioli, J. Bibette et B. Dubertret, Encapsulation of magnetic and fluorescent nanoparticles in emulsion droplets, *Langmuir* **21**, 4175-4179 (2005).
- [6] B. Rotenberg, A. Cadène, J.-F. Dufrêche, S. Durand-Vidal, J.-C. Badot et P. Turq, An analytical model for probing ion dynamics in clays with Broadband Dielectric Spectroscopy, *J. Phys. Chem. B* **109**, 15548-15557 (2005).
- [7] B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, et P. Turq, Frequency-dependent dielectric permittivity of salt-free charged lamellar systems, *J. Chem. Phys.* **123**, 154902-154913 (2005).
- [8] D. Zerrouki, B. Rotenberg, S. Abramson, J. Baudry, C. Goubault, F.L. Calderon, D. Pine et J. Bibette, Preparation of doublet, triangular, and tetrahedral colloidal clusters by controlled emulsification, *Langmuir* **22**, 57-62 (2006).
- [9] B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, B. Bagchi, E. Giffaut, J.-P. Hansen et P. Turq, Ion dynamics in compacted clays : Derivation of a two-state diffusion-reaction scheme from the lattice Fokker-Planck equation, *J. Chem. Phys.* **124**, 154701-154712 (2006).
- [10] D. Moroni, B. Rotenberg, J.-P. Hansen, S. Succi, et S. Melchionna, Solving the Fokker-Planck kinetic equation on a lattice, *Phys. Rev. E* **73**, 066607 (2006).
- [11] B. Rotenberg et D. Moroni, Second-order lattice Fokker-Planck algorithm from the trapezoidal rule, *Phys. Rev. E* **74**, 037701 (2006).
- [12] B. Rotenberg, V. Marry, J.-F. Dufrêche, E. Giffaut et P. Turq, A multiscale approach to ion diffusion in clays : Building a two-state diffusion-reaction scheme from microscopic dynamics, *J. Coll. and Interf. Sci.* **309**, 289-295 (2007).
- [13] B. Rotenberg, V. Marry, R. Vuilleumier, N. Malikova, C. Simon et P. Turq, Water and ions in clays : Unraveling the interlayer/micropore exchange using molecular dynamics, *Geochimica et Cosmochimica Acta* **71**, 5089-5101 (2007).
- [14] B. Rotenberg, V. Marry, J.-F. Dufrêche, N. Malikova, E. Giffaut et P. Turq, Modeling water and ion diffusion in clays : A multiscale approach, *Comptes Rendus Chimie* **10**, 1108-1116 (2007).
- [15] V. Marry, B. Rotenberg et P. Turq, Structure and dynamics of water at a clay surface from molecular dynamics simulation, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **10**, 4802-4813 (2008).
- [16] B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel, Dispersion of charged tracers in charged porous media, *Europhys. Lett.* **83**, 34004 (2008).
- [17] M. Jardat, J.-F. Dufrêche, V. Marry, B. Rotenberg et P. Turq, Salt exclusion in charged porous media : A coarse-graining strategy in the case of montmorillonite clays, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, 2023-2033 (2009).
- [18] B. Rotenberg, J.-P. Morel, V. Marry, P. Turq et N. Morel-Desrosiers, On the driving force of cation exchange in clays : Insights from combined microcalorimetry experiments and molecular simulations, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **73**, 4034-4044 (2009).
- [19] B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel, Coarse-grained simulations of charge, current and flow in heterogeneous media, *Faraday Discussions*, **144**, 223-243 (2010). Cet article fait la **couverture du volume "Multiscale Modelling of Soft Matter"**.
- [20] N. Malikova, E. Dubois, V. Marry, B. Rotenberg et P. Turq, Dynamics in clays - combining neutron scattering and microscopic simulation, *Z. Phys. Chem*, **244**, 153-181 (2010).
- [21] B. Rotenberg, M. Salanne, C. Simon et R. Vuilleumier, From localized orbitals to material properties : Building classical force fields for nonmetallic condensed matter systems, *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 138301 (2010).
- [22] B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova et P. Turq, Molecular simulation of aqueous solutions at clays surfaces, *J. Phys. Cond. Matt.*, **22** 284114 (2010).

- [23] I. Pagonabarraga, B. Rotenberg et D. Frenkel, Recent advances in the modelling and simulation of electrokinetic effects : bridging the gap between atomistic and macroscopic descriptions (Perspective Article), *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **12**, 9566 (2010).
- [24] A. Botan, B. Rotenberg, V. Marry, P. Turq et B. Noetinger, Carbon Dioxide in Montmorillonite Clay Hydrates : Thermodynamics, Structure, and Transport from Molecular Simulation, *J. Phys. Chem. C*, **114**, 14962 (2010).
- [25] A. Botan, B. Rotenberg, V. Marry, P. Turq et B. Noetinger, Hydrodynamics in clay nanopores, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 16109 (2011).
- [26] C. Merlet, M. Salanne, B. Rotenberg et P.A. Madden, Imidazolium Ionic Liquid Interfaces with Vapor and Graphite : Interfacial Tension and Capacitance from Coarse-Grained Molecular Simulations, *J. Phys. Chem. C*, **115**, 16613 (2011).
- [27] B. Rotenberg, A.J. Patel et D. Chandler, Molecular explanation for why talc surfaces can be both hydrophilic and hydrophobic, *J. Am. Chem. Soc.*, **133**, 20521 (2011).
- [28] M. Salanne, B. Rotenberg, S. Jahn, R. Vuilleumier, C. Simon et P.A. Madden, Including many-body effects in models for ionic liquids, *Theo. Chem. Acc.*, **131**, 1143 (2012).
- [29] S. Tazi, J. Molina, B. Rotenberg, P. Turq, R. Vuilleumier et M. Salanne, A transferable ab-initio based force field for aqueous ions, *J. Chem. Phys.*, **136**, 114507 (2012).
- [30] C. Merlet, B. Rotenberg, P.A. Madden, P.-L. Taberna, P. Simon, Y. Gogotsi et M. Salanne, On the molecular origin of supercapacitance in nanoporous carbon electrodes, *Nature Mater.*, **11**, 306 (2012).
- [31] C. Merlet, M. Salanne et B. Rotenberg, New Coarse-Grained Models of Imidazolium Ionic Liquids for Bulk and Interfacial Molecular Simulations *J. Phys. Chem. B*, **116**, 7687 (2012).
- [32] S. Tazi, A. Botan, M. Salanne, V. Marry, P. Turq et B. Rotenberg, Diffusion coefficient and shear viscosity of rigid water models, *J. Phys. Cond. Matt.*, **24**, 284117 (2012).
- [33] S. Tazi, B. Rotenberg, M. Salanne, M. Sprik and M. Sulpizi, Absolute acidity of clay edge sites from ab-initio simulations, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **94**, 1 (2012).
- [34] M. Levesque, O. Bénichou, R. Voituriez and B. Rotenberg, Taylor Dispersion with Adsorption and Desorption, *Phys. Rev. E*, **86**, 036316 (2012).
- [35] M. Levesque, V. Marry, B. Rotenberg, G. Jeanmairet, R. Vuilleumier and D. Borgis, Solvation of Complex Surfaces via Molecular Density Functional Theory, *J. Chem. Phys.*, **137**, 224107 (2012).
- [36] C. Merlet, C. Péan, B. Rotenberg, P.A. Madden, P. Simon et M. Salanne, Simulating Supercapacitors : Can We Model Electrodes as Constant Charge Surfaces ? *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**, 264 (2013).
- [37] A. Botan, V. Marry, B. Rotenberg, P. Turq et B. Noetinger, How Electrostatics Influences Hydrodynamic Boundary Conditions : Poiseuille and Electro-Osmotic Flows in Clay Nanopores, *J. Phys. Chem. C*, **117**, 978 (2013).
- [38] M. Levesque, O. Benichou et B. Rotenberg, Molecular diffusion between walls with adsorption and desorption, *J. Chem. Phys.*, **138**, 034107 (2013).
- [39] C. Merlet, M. Salanne, B. Rotenberg et P.A. Madden, Influence of solvation on the structural and capacitive properties of electrical double layer capacitors, *Electrochimica Acta*, **101**, 262 (2013).
- [40] B. Rotenberg et I. Pagonabarraga, Electrokinetics : insights from simulation on the microscopic scale (Topical Review), *Mol. Phys.*, **111**, 827 (2013).
- [41] M. Levesque, M. Duvail, I. Pagonabarraga, D. Frenkel et B. Rotenberg, Accounting for adsorption and desorption in Lattice-Boltzmann simulations, *Phys. Rev. E*, **88**, 013308 (2013).
- [42] A. Obliger, M. Duvail, M. Jardat, D. Coelho, S. Bekri et B. Rotenberg, Numerical homogenization of electrokinetic equations in porous media using Lattice-Boltzmann simulations, *Phys. Rev. E*, **88**, 013019 (2013).
- [43] D.T. Limmer, C. Merlet, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden, R. van Roij et B. Rotenberg, Charge fluctuations in nano-scale capacitors *Phys. Rev. Lett.*, **111**, 106102 (2013).
- [44] C. Merlet, B. Rotenberg, P.A. Madden et M. Salanne, Computer simulations of ionic liquids at electrochemical interfaces (Perspective Article), *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **15**, 15781 (2013).
- [45] A. Botan, V. Marry, B. Rotenberg, P. Turq et B. Noetinger, Correction to “How Electrostatics Influences Hydrodynamic Boundary Conditions : Poiseuille and Electro-Osmotic Flows in Clay Nanopores”, *J. Phys. Chem. C*, **117**, 20376 (2013).
- [46] C. Merlet, C. Péan, B. Rotenberg, P.A. Madden, B. Daffos, P.-L. Taberna, P. Simon et M. Salanne, Highly confined ions store charge more efficiently in supercapacitors, *Nature Comm.*, **4**, 2701 (2013).

- [47] L.M. Hamm, I.C. Bourg, A.F. Wallace et B. Rotenberg, Molecular Simulation of CO₂- and CO₃-Brine-Mineral Systems, *Rev. Mineral. Geochem.*, **77**, 189 (2013).
- [48] A. Carof, V. Marry, M. Salanne, J.-P. Hansen, P. Turq et B. Rotenberg, Coarse-graining the dynamics of nano-confined solutes : The case of ions in clays, *Mol. Simul.*, **40**, 237 (2013).
- [49] D. Borgis, R. Assaraf, B. Rotenberg et R. Vuilleumier, Computation of pair distribution functions and three-dimensional densities with a reduced variance principle, *Mol. Phys.*, **111**, 3486 (2013).
- [50] C. Péan, C. Merlet, B. Rotenberg, P.A. Madden, P.-L. Taberna, B. Daffos, M. Salanne et P. Simon, On the dynamics of charging in nanoporous carbon-based supercapacitors, *ACS Nano*, **8**, 1576 (2014).
- [51] A. Carof, R. Vuilleumier et B. Rotenberg, Two algorithms to compute projected correlation functions in molecular dynamics simulations, *J. Chem. Phys.*, **140**, 124103 (2014).
- [52] A. Obliger, M. Jardat, D. Coelho, S. Bekri et B. Rotenberg, Pore network model of electrokinetic transport through charged porous media, *Phys. Rev. E*, **89**, 043013 (2014).
- [53] B. Ancian *et al.*, Pierre Turq, an inspirational scientist in charge and at interfaces, *Mol. Phys.*, **112**, 1213 (2014).
- [54] B. Rotenberg, O. Bernard et J.-P. Hansen, Salt-induced effective interactions and phase separation of an ultrasoft model of polyelectrolytes *Mol. Phys.*, **112**, 1313 (2014).
- [55] G. Jeanmairet, V. Marry, M. Levesque, B. Rotenberg et D. Borgis, Hydration of Clays at the Molecular Scale : The Promising Perspective of Classical Density Functional Theory, *Mol. Phys.*, **112**, 1320 (2014).
- [56] R. Joubaud, O. Bernard, B. Rotenberg, P. Turq, A. Delville et A. Ern, Numerical study of DFT with Mean Spherical Approximation for ionic condensation in highly charged confined electrolytes, *Phys. Rev. E*, **89**, 062302 (2014).
- [57] D. Duarte, M. Salanne, B. Rotenberg, M.A. Bizeto et L.J.A. Siqueira, Structure of tetraalkylammonium ionic liquids in the interlayer of modified Montmorillonite, *J. Phys. : Condens. Matter*, **26**, 284107 (2014).
- [58] C. Merlet, D.T. Limmer, M. Salanne, R. van Roij, P.A. Madden, D. Chandler et B. Rotenberg, The Electric Double Layer Has a Life of Its Own, *J. Phys. Chem. C*, **118**, 18291 (2014). Cet article fait la **couverture du volume et l'objet d'un Editorial** d'A. Kornyshev et R. Qiao.
- [59] B. Rotenberg, V. Marry, M. Salanne, M. Jardat et P. Turq, Multiscale modelling of transport in clays, from the molecular to the sample scale, *C.R. Geoscience*, **346**, 298 (2014).
- [60] B. Rotenberg, Water in clay nanopores, *MRS Bulletin*, **39**, 1074 (2014).
- [61] A. Carof, M. Salanne, T. Charpentier et B. Rotenberg, Accurate Quadrupolar NMR Relaxation Rates of Aqueous Cations from Classical Molecular Dynamics, *J. Phys. Chem. B*, **118**, 13252 (2014).
- [62] C. Pean, B. Daffos, C. Merlet, B. Rotenberg, P.-L. Taberna, P. Simon and M. Salanne, Single electrode capacitances of porous carbons in neat ionic liquid electrolyte at 100°C : a combined experimental and modeling approach, *J. Electrochem. Soc.*, **162**, A5091 (2015).
- [63] J.-M. Vanson, F.-X. Coudert, B. Rotenberg, M. Levesque, C. Tardivat, M. Klotz and A. Boutin, Unexpected coupling between flow and adsorption in porous media, *Soft Matter*, **11**, 6125 (2015).
- [64] W. Louisfremea, B. Rotenberg, F. Porcher, J.-L. Paillaud, P. Massiani and A. Boutin, Cation redistribution upon dehydration of Na₅₈Y faujasite zeolite : a joint neutron diffraction and molecular simulation study, *Mol. Simul.*, **41**(16-17), 1371 (2015).
- [65] B. Rotenberg, G. Jackson and D. Frenkel, Jean-Pierre Hansen - a stimulating history of simulating fluids, *Mol. Phys.*, **113**(17-18), 2363 (2015).
- [66] D. R. Ceratti, A. Obliger, M. Jardat, B. Rotenberg and V. Dahirel, Stochastic Rotation Dynamics simulation of electro-osmosis, *Mol. Phys.*, **113**(17-18), 2476 (2015).
- [67] A. Botan, V. Marry and B. Rotenberg, Diffusion in bulk liquids : finite-size effects in anisotropic systems, *Mol. Phys.*, **113**(17-18), 2674 (2015).
- [68] C. Péan, B. Daffos, B. Rotenberg, P. Levitz, M. Haefele, P.-L. Taberna, P. Simon and M. Salanne, Confinement, desolvation and electrosorption effects on the diffusion of ions in nanoporous carbon electrodes, *J. Am. Chem. Soc.*, **137**(39), 12627 (2015).
- [69] A. Carof, M. Salanne, T. Charpentier and B. Rotenberg, On the Microscopic Fluctuations Driving the NMR Relaxation of Quadrupolar Ions in Water, *J. Chem. Phys.*, **143**, 194504 (2015).
- [70] B. Rotenberg and M. Salanne, Structural Transitions at Ionic Liquid Interfaces, *J. Phys. Chem. Lett.*, **6**, 4978 (2015).

- [71] P. Bacle, J.-F. Dufrêche, B. Rotenberg, I.C. Bourg, V. Marry, Modeling the transport of water and ionic tracers in a micrometric clay sample, *App. Clay Sci.*, **123**, 18 (2016).
- [72] S. Tesson, M. Salanne, B. Rotenberg, S. Tazi, V. Marry, A Classical Polarizable Force Field for Clays : Pyrophyllite and Talc, *J. Phys. Chem. C*, **120**, 3749 (2016).
- [73] D. Lesnicki, R. Vuilleumier, A. Carof, B. Rotenberg, Molecular hydrodynamics from memory kernels, *Phys. Rev. Lett.*, **116**, 147804 (2016).
- [74] C. Péan, B. Rotenberg, P. Simon, M. Salanne, Understanding the different (dis)charging steps of supercapacitors : influence of potential and solvation, *Electrochim. Acta*, **206**, 504 (2016).
- [75] C. Péan, B. Rotenberg, P. Simon, M. Salanne, Multi-scale modelling of supercapacitors : From molecular simulations to a transmission line model, *J. Power Sources*, **326**, 680 (2016).
- [76] M. Salanne, B. Rotenberg, K. Naoi, K. Kaneko, P.-L. Taberna, C.P. Grey, B. Dunn, P. Simon, Efficient storage mechanisms for building better supercapacitors, *Nature Energy*, **1**, 16070 (2016).
- [77] W. Louisfrema, J.-L. Paillaud, F. Porcher, E. Perrin, T. Onfroy, P. Massiani, A. Boutin, B. Rotenberg, Cation Migration and Structural Deformations upon Dehydration of Nickel-Exchanged NaY Zeolite : A Combined Neutron Diffraction and Monte Carlo Study, *J. Phys. Chem. C*, **120**, 18115 (2016).
- [78] A. Carof, M. Salanne, T. Charpentier, B. Rotenberg, Collective water dynamics in the first solvation shell drive the NMR relaxation of aqueous quadrupolar cations, *J. Chem. Phys.*, **145**, 124508 (2016).
- [79] S. Tesson, W. Louisfrema, M. Salanne, A. Boutin, B. Rotenberg, V. Marry, Classical Polarizable Force Field To Study Dry Charged Clays and Zeolites, *J. Phys. Chem. C*, **121**, 9833 (2017).
- [80] P. Simonnin, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi, V. Marry, B. Rotenberg, Diffusion under confinement : hydrodynamic finite-size effects in simulation, *J. Chem. Theory Comput.*, **13**, 2881 (2017).
- [81] A.J. Asta, M. Levesque, R. Vuilleumier, B. Rotenberg, Transient hydrodynamic finite-size effects in simulations under periodic boundary conditions, *Phys. Rev. E*, **95**, 061301 (2017).
- [82] V. Sergiievskiy, M. Levesque, B. Rotenberg, D. Borgis, Solvation in atomic liquids : Connection between Gaussian field theory and Density Functional Theory, *Condens. Matter Phys.*, **20**, 33005 (2017).
- [83] M. Salanne, S. Tazi, R. Vuilleumier, B. Rotenberg, Ca^{2+} - Cl^- association in water revisited : the role of cation hydration, *Chem. Phys. Chem.*, **18**, 2807 (2017).
- [84] B. Rotenberg, O. Bernard and J.-P. Hansen, Underscreening in ionic liquids : a first principles analysis, *J. Phys. Condens. Matter*, **30**, 054005 (2018).
- [85] T. Mendez-Morales, M. Burbano, M. Haefele, B. Rotenberg and M. Salanne, Ion-ion correlations across and between electrified graphene layers, *J. Chem. Phys.*, **148**, 193812 (2018).
- [86] R. Evans, A. Galindo, G. Jackson, R. Lynden-Bell, B. Rotenberg, Daan Frenkel – An entropic career, *Mol. Phys.*, **116**(21-22), 2737 (2018).
- [87] A. Asta, M. Levesque, B. Rotenberg, Moment propagation method for the dynamics of charged adsorbing/desorbing species at solid-liquid interfaces, *Mol. Phys.*, **116**(21-22), 2965 (2018).
- [88] A.A. Lee, J.-P. Hansen, O. Bernard and B. Rotenberg, Casimir force in dense confined electrolytes, *Mol. Phys.*, **116**(21-22), 3147 (2018).
- [89] R. Hande, V. Ramothe, S. Tesson, B. Dazas, E. Ferrage, B. Lanson, M. Salanne, B. Rotenberg and V. Marry, Classical polarizable force field to study hydrated hectorite : optimization on DFT calculations and validation against XRD data, *Minerals*, **8**, 205 (2018).
- [90] M. Simoncelli, N. Ganfoud, A. Sene, M. Haefele, B. Daffos, P.-L. Taberna, M. Salanne, P. Simon and B. Rotenberg, Blue energy and desalination with nanoporous carbon electrodes : Capacitance from molecular simulations to continuous models *Phys. Rev. X*, **8**, 021024 (2018).
- [91] H. Yoshida, V. Kaiser, B. Rotenberg and L. Bocquet, Driplons as localized and superfast ripples of water confined between graphene sheets, *Nature Commun.*, **9**, 1496 (2018).
- [92] P. Simonnin, V. Marry, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi and B. Rotenberg, Mineral- and Ion-Specific Effects at Clay-Water Interfaces : Structure, Diffusion and Hydrodynamics, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 18484 (2018).
- [93] Z. Li, G. Jeanmairat, T. Mendez-Morales, B. Rotenberg and M. Salanne, Capacitive Performance of Water-in-Salt Electrolyte in Supercapacitors : A Simulation Study, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 23917 (2018).
- [94] S. Tesson, W. Louisfrema, M. Salanne, A. Boutin, E. Ferrage, B. Rotenberg and V. Marry, Classical Polarizable Force Field To Study Hydrated Charged Clays and Zeolites, *J. Phys. Chem. C*, **122**, 24690 (2018).

- [95] T. Mendez-Morales, N. Ganfoud, Z. Li, M. Haefele, B. Rotenberg and M. Salanne, Performance of Microporous Carbon Electrodes for Supercapacitors : Comparing Graphene with Disordered Materials, *Energy Storage Materials*, **17**, 88 (2019).
- [96] G. Jeanmairat, B. Rotenberg, M. Levesque, D. Borgis and M. Salanne, A Molecular Density Functional Theory Approach to Electron Transfer Reactions, *Chemical Science*, **10**, 2130 (2019).
- [97] N. Dubouis, C. Park, M. Deschamps, S. Abdelghani-Idrissi, M. Kanduc, A. Colin, M. Salanne, J. Dzubiella, A. Grimaud, B. Rotenberg, Chasing Aqueous Biphasic Systems from Simple Salts by Exploring the LiTFSI/LiCl/H₂O Phase Diagram, *ACS Cent. Sci.*, **5**, 640 (2019).
- [98] N. Ganfoud, A. Sene, M. Haefele, A. Marin-Lafèche, B. Daffos, P.-L. Taberna, M. Salanne, P. Simon, B. Rotenberg, Effect of the carbon microporous structure on the capacitance of aqueous supercapacitors *Energy Storage Materials*, **21**, 190 (2019).
- [99] S.W. Coles, D. Borgis, R. Vuilleumier, B. Rotenberg, Computing three-dimensional densities from force densities improves statistical efficiency, *J. Chem. Phys.*, **151**, 064124 (2019).
- [100] A. Asta, I. Palaia, E. Trizac, M. Levesque, B. Rotenberg, Lattice Boltzmann Electrokinetics simulation of nanocapacitors, *J. Chem. Phys.*, **151**, 114104 (2019).
- [101] G. Jeanmairat, B. Rotenberg, D. Borgis, M. Salanne, Study of a water-graphene capacitor with molecular density functional theory, to appear in *J. Chem. Phys.*
- [102] T. Dufils, G. Jeanmairat, B. Rotenberg, M. Sprik, M. Salanne, Simulating electrochemical systems by combining the finite field method with a constant potential electrode, to appear in *Phys. Rev. Lett.*

REVUES NATIONALES (AVEC COMITÉ DE LECTURE)

- [103] B. Rotenberg, Physicochimie des interfaces chargées : modélisation multi-échelle et applications pour l'énergie, *L'Actualité Chimique*, **384**, 21 (2014).
- [104] M. Salanne, B. Rotenberg et P. Simon, Plus d'électricité dans les carbones, *La Recherche*, **491**, 52 (2014).
- [105] C. Merlet, C. Péan, M. Salanne et B. Rotenberg, Stockage de charge dans les carbones nanoporeux : L'origine moléculaire de la supercapacité, *L'Actualité Chimique*, **408-409**, 43 (2016).
- [106] B. Rotenberg, M. Salanne, et P. Simon, Vers des supercondensateurs plus performants : quand expériences et simulations permettent d'élucider les mécanismes à l'échelle nanométrique, *L'Actualité Chimique*, **413**, 48 (2016).

ACTES DE CONGRÈS (AVEC COMITÉ DE LECTURE)

- [107] A. Cadène, B. Rotenberg, S. Durand-Vidal, J.-C. Badot et P. Turq, Dielectric Spectroscopy as a probe for dynamic properties of compacted smectites, *Phys. Chem. Earth* **31**, 505-510 (2006).
- [108] B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, R. Vuilleumier, J.-F. Dufrêche, E. Giffaut et P. Turq, Ions at clay particle surfaces and ionic exchange : A molecular dynamics study, in *Mobile Fission and Activation Products in Nuclear Waste Disposal*, NEA/OECD Ed., p.147-156 (2009).
- [109] J.-F. Dufrêche, B. Rotenberg, V. Marry et P. Turq, Bridging molecular and continuous descriptions : The case of dynamics in clays, *Annals of the Brazilian Academy of Sciences*, **82**, 61-68 (2010).
- [110] J.-F. Dufrêche, N. Malikova, M. Jardat, G. Méridguet, E. Dubois, B. Rotenberg, V. Marry, J. Molina et P. Turq, Experiments, Simulations, Theories : Multiscale approaches for solutions *Collection SFN*, **12**, 263-283 (2011).
- [111] B. Rotenberg, How is the current nano/microscopic knowledge implemented in model approaches? in *Clay characterisation from nanoscopic to microscopic resolution*, NEA/OECD Ed., 142-146 (2013).
- [112] A. Obliger, M. Jardat, D. Coelho, S. Békri, B. Rotenberg, Upscaling electrokinetic transport in clays with Lattice Boltzmann and Pore Network Models, *Clay Minerals Society Workshop Lectures Series*, **21**, Chap. 10, 129-135 (2016).
- [113] B. Rotenberg, Exemple du projet Cigéo (Centre industriel de stockage géologique), in *Modélisation : succès et limites*, Actes du colloque organisé par le CNRS et l'Académie des technologies le 6 décembre 2016 (2018).

CHAPITRES D'OUVRAGES

- [114] B. Rotenberg et M. Cathelineau, Entreposage et Stockage in *L'Energie à Découvert*, p. 120, dir. C. Jeandel et R. Mosseri, CNRS Editions (2013).
- [115] C. Merlet, M. Salanne, P.A. Madden and B. Rotenberg, The electrode - ionic liquid interface : a molecular point of view, in *New Challenges in Electrostatics of Soft and Disordered Matter*, p. 155, Ed. D.S. Dean, J. Dobnikar, A. Naji, R. Podgornik, Pan Stanford Publishing, Singapore (2013).
- [116] I. Pagonabarraga and B. Rotenberg, Modelling electrokinetic effects at different scales, in *New Challenges in Electrostatics of Soft and Disordered Matter*, p. 169, Ed. D.S. Dean, J. Dobnikar, A. Naji, R. Podgornik, Pan Stanford Publishing, Singapore (2013).
- [117] P. Turq, B. Rotenberg, V. Marry and J.-F. Dufrêche, Ions in clays, *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*, p. 1140, Springer (2014).
- [118] V. Marry and B. Rotenberg, Up-scaling strategies for modeling clay-rock properties, in *Natural and Engineered Clay Barriers, Developments in Clay Science*, **6**, 399, C. Tournassat, C.I. Steefel, I.C. Bourg and F. Bergaya (Eds), Elsevier (2015).

Conférences et autres communications

CONFÉRENCES INVITÉES DANS DES CONGRÈS

- [1] *CECAM Workshop "Modelling and simulation of clays over various scales of time and space"*, Lyon [06/2006]. Coarse-graining ion dynamics in clays : from micro to meso to macro with Lattice Fokker-Planck, B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, B. Bagchi, E. Giffaut, J.-P. Hansen et P. Turq.
- [2] *CECAM Workshop "Common trends between Kinetic theory, Dynamical Density Functional methods and mesoscopic methods based on effective free energy models"*, Lausanne, Suisse [10/2008]. Lattice kinetic methods for the study of electrokinetic phenomena in charged porous media, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.
- [3] **Keynote speaker**, *MIGRATION 09 : 12th International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere*, Kennewick, WA, Etats-Unis [09/2009]. Diffusion and retention in clays : What can we learn from first-principles, molecular and mesoscopic simulations ?, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, M. Jardat, J.-F. Dufrêche et P. Turq
- [4] *VII^e Rencontres LLB-Soleil Confinement et Nano-systèmes*, Saint-Aubin [03/2009]. Ion-specific effects at clay-water interfaces : Insights from molecular simulations, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova et P. Turq.
- [5] *Journées du Groupement de Recherche PARIS "Hydrogène et stockage des déchets nucléaires"*, Paris [12/2010]. Modélisation moléculaire d'argile en présence d'eau et de gaz, B. Rotenberg, A. Botan, V. Marry, P. Turq et B. Noetinger.
- [6] *32nd International Conference on Solution Chemistry*, La Grande Motte [08/2011]. Accurate force fields from ab-initio simulations : The case of aqueous ions, B. Rotenberg, S. Tazi, J. Molina, et M. Salanne.
- [7] *NEA Clay Club workshop "Clays under Nano- to Microscopic resolution"*, Karlsruhe, Allemagne [09/2011], How is the current nano/microscopic knowledge implemented in model approaches ? B. Rotenberg
- [8] *Mini Statistical Mechanics Meeting*, Berkeley, CA, Etats-Unis [01/2012]. Charging of nanoporous carbon electrodes : The molecular origin of supercapacitance, B. Rotenberg, C. Merlet, M. Salanne et P.A. Madden.
- [9] *CECAM Workshop "Aging of Engineering Materials : a Computational Approach to Durability and Sustainability"*, Zürich, Suisse [02/2012]. Mesoscopic simulation of charge, current and flow in heterogeneous media, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.
- [10] *CECAM Workshop "New Challenges in Electrostatics of Soft and Disordered Matter"*, Toulouse [05/2012]. Charging of nanoporous carbon electrodes : The molecular origin of supercapacitance, B. Rotenberg, C. Merlet, M. Salanne et P.A. Madden.
- [11] *Journées annuelles du Groupe Français des Carbones*, Voreppe [05/2013]. Stockage de charge dans les carbones nanoporeux : l'origine moléculaire de la super-capacité, B. Rotenberg, C. Merlet, M. Salanne et P.A. Madden.
- [12] *Physics of Complex Colloids - COMPLOIDS 2013*, Ljubljana, Slovénie [05/2013]. Charging of nanoporous carbon electrodes : The molecular origin of supercapacitance, B. Rotenberg, C. Merlet, M. Salanne et P.A. Madden.

- [13] *Workshop Modélisation des oxydes (GDRs Mod Mat et Co-DFT)*, Paris [09/2013]. Propriétés de surfaces minérales : hydrophilie/hydrophobie et acidité de minéraux argileux, B Rotenberg.
- [14] *International symposium on CO₂ capture : Microscopic studies and applications*, Champs-sur-Marne [09/2013]. CO₂ sequestration in aquifers : microscopic simulation of clays in contact with a CO₂ reservoir, B. Rotenberg.
- [15] *50th anniversary of the Clay Minerals Society*, Urbana-Champaign, IL, Etats-Unis [10/2013]. Molecular explanation for why talc surfaces can be both hydrophilic and hydrophobic, B. Rotenberg, A.J. Patel et D. Chandler.
- [16] *Journées Francophones des Jeunes Physico-Chimistes - JFJPC14*, Fréjus [10/2013]. Physicochimie des interfaces chargées : modélisation multi-échelles et applications pour l'énergie, B. Rotenberg.
- [17] *CFCAM Workshop Approche moléculaire expérimentale et théorique des interfaces oxydes/eau*, Paris [12/2013]. Propriétés de surfaces minérales : hydrophilie/hydrophobie et acidité de minéraux argileux, B Rotenberg.
- [18] *ACS Spring Meeting*, Dallas, TX, Etats-Unis [03/2014]. Charge fluctuations in nanoscale capacitors, B Rotenberg, C. Merlet, D. Limmer, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden et R. van Roij.
- [19] *ACS Spring Meeting*, Dallas, TX, Etats-Unis [03/2014]. Interfacial properties of clay minerals : Surface acidity and polarizable force field parametrization from ab-initio simulations, B Rotenberg, S. Tazi, M. Salanne, V. Marry, S. Tesson, M. Sulpizi et M. Sprik.
- [20] *Science and Technology in Society (STS) Forum*, Kyoto, Japon [10/2014]. Participant in the « Future Leaders program ».
- [21] *Statistical Mechanics in Physics, Chemistry, and Biology : A symposium celebrating David Chandler's 70th Birthday*, MIT, Cambridge, MA, Etat-Unis [10/2014]. Charge fluctuations in nanoscale capacitors, B Rotenberg, C. Merlet, D. Limmer, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden et R. van Roij.
- [22] *CECAM Workshop "Molecular hydrodynamics meets fluctuating hydrodynamics"*, Madrid [05/2015]. Computing Memory Functions Using Molecular Dynamics Simulation, B. Rotenberg, A. Carof, D. Lesnicki et R. Vuilleumier.
- [23] *NEA Clay Club workshop "Filling the gaps - from microscopic pore structures to transport properties in shales"*, Edimbourg, Royaume-Uni [07/2015], Upscaling electrokinetic transport in clays with Lattice Boltzmann and Pore Network Models, B. Rotenberg, A. Obliger, M. Jardat, D. Coelho et S. Bekri.
- [24] *Gordon Research Conference "Physics and Chemistry of Liquids"*, Holderness, NH, Etats-Unis [08/2015], Voltage-driven phase transitions in room temperature ionic liquids at electrochemical interfaces, B Rotenberg, C. Merlet, D. Limmer, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden et R. van Roij.
- [25] *Workshop on Water at the Interface between Biology, Chemistry, Physics and Materials Sciences*, Trieste, Italie [10/2015], Water and ions in clays, B Rotenberg.
- [26] *"Liquids at interfaces"*, Les Houches [10/2015], Room temperature ionic liquids at electrochemical interfaces, B Rotenberg, C. Merlet, D. Limmer, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden et R. van Roij.
- [27] *CECAM Workshop "Interactions and Transport of Charged Species in Bulk and at Interfaces"*, Vienne, Autriche [07/2016], Structural transitions at ionic liquid interfaces, B Rotenberg, C. Merlet, D. Limmer, M. Salanne, D. Chandler, P.A. Madden et R. van Roij.
- [28] **Keynote speaker**, *10th Liquid Matter Conference*, Ljubljana, Slovénie [07/2017], Structural transitions at ionic liquid interfaces, B Rotenberg.
- [29] **Keynote speaker**, *Goldschmidt 2017*, Paris [08/2017], Multiscale modeling of electrokinetic transport in porous materials, B Rotenberg.
- [30] **Keynote speaker**, *MIGRATION 17 : 16th International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere*, Barcelone, Espagne [09/2017]. Micro- and mesoscopic simulations of clay and cement-based materials, B. Rotenberg.
- [31] *Journées scientifiques de l'Association Française d'Adsorption*, Marseille [01/2018]. Transport and adsorption in charged porous media : from molecular to mesoscopic simulations, B. Rotenberg.
- [32] *David Chandler Linnett Memorial Symposium*, Cambridge, Royaume-Uni [04/2018]. Fluctuations in bulk and interfacial fluids, B. Rotenberg.
- [33] *Journées de Physique Statistique*, Paris [02/2019]. Underscreening and Casimir force in confined ionic liquids, B. Rotenberg.
- [34] *Molecular and materials simulation at the turn of the decade : Celebrating 50 years of CECAM*, Lausanne, Suisse [09/2019]. "Use the Force !" Reduced Variance Estimators for Radial Distribution Functions, Generic 3D Densities and (Local) Transport Coefficients, B. Rotenberg.

COMMUNICATIONS À DES CONGRÈS

- [1] *Thermodynamics 2003*, Cambridge, Royaume-Uni [04/2003] **poster**, Phase diagrams of colloids / non-ideal polymer mixtures, B. Rotenberg, J. Dzubiella, A.A. Louis et J.-P. Hansen.
- [2] *MIGRATION 05 : 10th International Conference on Chemistry and Migration Behaviour of Actinides and Fission Products in the Geosphere*, Avignon [09/2005] **communication orale**, Dielectric Spectroscopy as a probe for thermodynamic and dynamic properties of compacted smectites , B. Rotenberg, A. Cadène, N. Malikova, J.-F. Dufrêche, S. Durand-Vidal, P. Turq et J.-C. Badot.
- [3] *Journées du Groupement de Recherche PARIS (Physico-chimie des Actinides et Radionucléides aux Interfaces et en Solution)*, Avignon [03/2006] **poster**, Modélisation multi-échelles de la dynamique ionique dans les argiles, B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, E. Giffaut, J.-P. Hansen et P. Turq.
- [4] *International Electrokinetics Conference ELKIN 2006*, Nancy [06/2006] **communication orale**, Ionic mobility in charged confined media : building a two-state diffusion-reaction scheme from microscopic dynamics, B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, V. Marry, E. Giffaut, B. Bagchi, J.-P. Hansen et P. Turq.
- [5] *Mobile Fission and Activation Products in Nuclear Waste Disposal (International OECD / NEA Workshop)*, La Baule [01/2007] **communication orale**, Ions at clay particle surfaces and ionic exchange : A molecular dynamics study, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, R. Vuilleumier, J.-F. Dufrêche, E. Giffaut et P. Turq.
- [6] *Journées du Groupement de Recherche PARIS (Physico-chimie des Actinides et Radionucléides aux Interfaces et en Solution)*, Avignon [03/2007] **poster**, Interlayer / micropore exchange of water and ions in clays : A molecular dynamics study, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, R. Vuilleumier, E. Giffaut et P. Turq.
- [7] *Enchanted Clays - the 44th annual meeting of the Clay Minerals Society*, Santa Fe, Nouveau-Mexique, Etats-Unis [06/2007] **communication orale**, Water and ionic exchange between interlayer and microporosity from molecular dynamics simulation, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, R. Vuilleumier, E. Giffaut et P. Turq.
- [8] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Lille [09/2007] **poster**, Interlayer / micropore exchange of water and ions in clays : A molecular dynamics study, B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova, R. Vuilleumier, E. Giffaut et P. Turq.
- [9] *Thermodynamics 2007*, Rueil-Malmaison [09/2007] **communication orale**, A microcalorimetric investigation of the effect of temperature on the retention of Cs⁺ by Na-montmorillonite, J.-P. Morel, V. Marry, B. Rotenberg, P. Turq et Nicole Morel-Desrosiers.
- [10] *SimBioMa Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science*, Konstanz, Allemagne [04/2008] **poster**, Coarse-graining the dynamics of nanoconfined solutes, B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, V. Marry et P. Turq.
- [11] *7th Liquid Matter Conference*, Lund, Suède [06/2008] **poster**, Dispersion of charged tracers in charged porous media, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.
- [12] *14th International Clay Conference*, Castellaneta Marina, Italie [06/2009] **communication orale**, Mesoscopic modelling of ionic dispersion and diffusion in clays, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.
- [13] *CECAM Workshop "Modeling and Simulation of Water at Interfaces from Ambient to Supercooled Conditions"*, Lausanne, Suisse [08/2009] **communication orale**, Structure and dynamics of water at clay surfaces from molecular dynamics simulation , B. Rotenberg, V. Marry, N. Malikova et P. Turq.
- [14] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Nantes [03/2010] **poster**, Ionic dispersion and diffusion in clays : Mesoscopic modelling using the Lattice-Electrokinetics method, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.
- [15] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Nantes [03/2010] **poster**, Structure and dynamics of mobile species in clays from molecular simulations V. Marry, B. Rotenberg, J.-F. Dufrêche, N. Malikova et P. Turq.
- [16] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Nantes [03/2010] **poster**, Hydrated clays in contact with gas reservoirs : A molecular simulation study, A. Botan, V. Marry, B. Rotenberg, P. Turq et B. Noetinger.
- [17] *Mini Statistical Mechanics Meeting*, Berkeley, CA, Etats-Unis [01/2011] **poster**, Microscopic hydrophilicity vs. macroscopic hydrophobicity of clay surfaces, B. Rotenberg, A. Patel et D. Chandler.
- [18] *Interpore, 3rd International Conference on Porous Media*, Bordeaux [03/2011] **poster**, Mesoscopic simulation of charge, current and flow in porous media, B. Rotenberg, I. Pagonabarraga et D. Frenkel.

- [19] *International Conference on Flows and Mechanics in Natural Porous Media from Pore to Field Scale - Pore2Field*, Rueil-Malmaison [11/2011] **communication orale**, CO₂ storage in aquifers : classical molecular simulations of clay caprocks, B. Rotenberg, A. Botan, V. Marry, P. Turq et B. Noetinger.
- [20] *Mini Statistical Mechanics Meeting*, Berkeley, CA, Etats-Unis [01/2012] **communication orale**, Why can talc surfaces can be both hydrophilic and hydrophobic ?, B. Rotenberg, A. Patel et D. Chandler.
- [21] *Journées scientifiques de l'Association Française d'Adsorption*, Paris [05/2012] **communication orale**, Pourquoi les surfaces de talc peuvent être à la fois hydrophiles et hydrophobes, B. Rotenberg, A.J. Patel et D. Chandler.
- [22] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Montpellier [10/2012] **poster**, Molecular explanation for why talc surfaces can be both hydrophilic and hydrophobic, B. Rotenberg, A.J. Patel et D. Chandler.
- [23] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Montpellier [10/2012] **poster**, Acidity of clay edges from ab-initio simulations, S. Tazi, M. Salanne, B. Rotenberg, P. Turq, M. Sprik et M. Sulpizi.
- [24] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Montpellier [10/2012] **poster**, Accurate force fields from ab-initio simulations : The case of clays, S. Tazi, M. Salanne, B. Rotenberg et P. Turq.
- [25] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Montpellier [10/2012] **poster**, Hydrodynamics and electro-osmosis in clay by molecular simulation : Comparison of two force-fields, A. Botan, V. Marry, B. Rotenberg, P. Turq et B. Noetinger.
- [26] *International Symposium "Using Natural and Engineered Clay-based Barriers for the Containment of Radioactive Waste"*, Montpellier [10/2012] **poster**, Electrokinetic flows in cylindrical and slit capillaries in clays : From pore scale to sample scale, A. Obliger, M. Jardat, B. Rotenberg, M. Duvail, S. Bekri et D. Coelho.
- [27] *Journées Modélisation multi-échelle et applications aux procédés physico-chimiques*, Paris [02/2013], **communication orale**, Simulation mésoscopique sur réseau des systèmes interfaciaux complexes, B. Rotenberg
- [28] *International Conference "Clays in Natural and Engineered Barriers for Radioactive Waste Confinement"*, Bruxelles [03/2015] **poster**, Pore Network Model of electrokinetic transport through charged porous media, B. Rotenberg, A. Obliger, M. Jardat, D. Coelho et S. Bekri
- [29] *LowPerm2015*, Rueil-Malmaison [06/2015] **communication orale**, Pore Network Model of electrokinetic transport through charged porous media, B. Rotenberg, A. Obliger, M. Jardat, D. Coelho et S. Bekri
- [30] *SCF'15*, Lille [07/2015], **communication orale**, Charge storage in nanoporous carbons : The molecular origin of supercapacitance, B. Rotenberg, C. Merlet, C. Péan et M. Salanne
- [31] *Euroclay*, Paris [07/2019], **communication orale**, Mineral- and Ion-Specific Effects at Clay-Water Interfaces : Structure, Diffusion, and Hydrodynamics, B. Rotenberg, P. Simonnin, V. Marry, B. Noetinger et C. Nieto-Draghi

SÉMINAIRES

- [1] Département de chimie de l'université de Cambridge (Royaume-Uni) [02/2006]
- [2] Laboratoire Liquides Ioniques et Interfaces Chargées (UPMC) [04/2007]
- [3] FOM Institute for Atomic and Molecular Physics (Amsterdam, Pays-Bas) [11/2007]
- [4] CEA Saclay [02/2008]
- [5] Schlumberger Cambridge Research Center (Cambridge, Royaume-Uni) [10/2008]
- [6] FOM Institute for Atomic and Molecular Physics (Amsterdam, Pays-Bas) [10/2008]
- [7] Département de Physique de la Technische Universität de München (Allemagne) [07/2009]
- [8] Département de Chimie de l'Université de Californie, Berkeley [01/2010]
- [9] Département de Génie Chimique de l'Université de Californie, Berkeley [03/2010]
- [10] Département de Physique de l'Université de Barcelone, Espagne [06/2010]
- [11] Institut Français du Pétrole, Rueil-Malmaison [10/2010]
- [12] Département de Chimie de l'Université de Californie, Berkeley [01/2011]
- [13] Département de Physique de l'Université de Barcelone, Espagne [05/2011]
- [14] Ecole Normale Supérieure, Département de Chimie (Pôle de Physico-chimie Théorique) [06/2011]

- [15] IFP Energies Nouvelles, Rueil-Malmaison [09/2011]
- [16] Institut Paul Scherrer, Villigen, Suisse [10/2011]
- [17] BP Institute (Cambridge, Royaume-Uni) [11/2012]
- [18] Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (Université Paris Est) [11/2013]
- [19] Académie des Sciences, Section Géosciences [11/2013]
- [20] MIT, Department of Civil and Environmental Engineering, (Cambridge, MA, Etats-Unis) [01/2014]
- [21] Institut des Sciences Moléculaires (Nouvelle Université de Bordeaux) [06/2014]
- [22] Département de Physique de l'Université de Rome "La Sapienza", Italie [09/2014]
- [23] Institute for Theoretical Physics, Université d'Utrecht, Pays-Bas [10/2014]
- [24] Institut Charles Gerhardt, Montpellier [11/2014]
- [25] Ecole Normale Supérieure, Département de Chimie (Pôle de Physico-chimie Théorique) [12/2014]
- [26] Ecole Normale Supérieure, Département de Physique [01/2016]
- [27] Université de Mainz, Département de Physique [01/2016]
- [28] Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie, Allemagne [10/2016]
- [29] Université Paris Diderot (séminaire SCAN) [12/2016]
- [30] IFP Energies Nouvelles, Rueil-Malmaison [06/2017]
- [31] Institut de Physique de Rennes [10/2017]
- [32] Université de Mainz, Département de Physique [11/2018]
- [33] Freie Universität Berlin, Département de Physique [12/2018]

AUTRES

- [1] Journées de modélisation de Paris centre (ENS-ENSCP) [05/2006]
- [2] Journée des doctorants du Groupe Français des Argiles (Ecole des Mines, Paris) [11/2006]
- [3] Journée commune des Groupements de Recherche PARIS et MOMAS (IHP, Paris) [03/2007]
- [4] Journée des doctorants de l'ANDRA (ENSCP) [06/2007]
- [5] Journée des doctorants de l'ANDRA (ENSCP) [06/2008]
- [6] Journée commune des GNR PARIS et MOMAS (Ecole Polytechnique) [03/2010]
- [7] Journées de modélisation de Paris centre (ENS-ENSCP) [06/2010]
- [8] Journée commune des GNR PARIS et MOMAS (Université Claude Bernard, Lyon) [11/2010]
- [9] Journée Modélisation en physicochimie pour le nucléaire (UPMC) [01/2011]
- [10] Journée de l'UMR PECSA, Paris [02/2011]
- [11] Comité de suivi des recherches sur l'aval du cycle (COSRAC, MESR, PARIS) [02/2013]
- [12] Journée des CR1 de l'Institut de Chimie (INC) du CNRS [06/2013]
- [13] Journée annuelle du LABEX MATISSE [06/2015]
- [14] Table ronde à la journée "Modélisation : succès et limites" (CNRS et Académie des Technologies) [12/2016]
- [15] Meeting annuel du réseau européen ETN NANOTRANS (Berlin) [02/2017]
- [16] Journée d'étude des liquides (Paris) [06/2018]
- [17] Réunion semestrielle du RS2E (Montpellier) [10/2018]
- [18] Rencontres prospectives du Réseau Français de Chimie Théorique (Nantes) [06/2019]