

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.

Mots clés : simulations moléculaires et mésoscopiques, coarse-graining, phénomènes électrocinétiques, interfaces et milieux poreux chargés, nanofluidique, argiles, supercondensateurs, énergie bleue, bruit électrique dans les électrolytes...

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 Cursus de chimie à l'École Normale Supérieure (Paris)

Expérience professionnelle

(Co-)direction de 8 thèses, co-encadrement de 4 autres thèses et 9 post-docs, encadrement de L3, M1 et M2.

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 UC 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

2021 Co-lauréat du Prix spécial Joseph Fourier (GENCI-Atos) pour le code MetalWalls

2020 Membre de la promotion "Cadres à haut potentiel 2020" du CNRS

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).
2015 – 2018 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)
Membre de jury ou rapporteur Master (Poitiers, Paris), **19 Thèses** (Paris, Orsay, Pau, Clermont-Ferrand, Marne-la-Vallée, Grenoble, Barcelone, Cambridge, Lund) et **6 HDR** (Paris, Lyon, Nantes, Clermont-Ferrand, Prague)

Partenariats et financement de projets

H2020 Porteur du projet **ERC Consolidator SENSES** (1.8M€, 2020-25)
Hôte de la Marie Curie Fellowship Molecular Control de Sophie Marbach, avec NYU (2020-2023)
Principal Investigator du réseau européen **FET-OPEN NANOPHLOW** (total 3.3M€, 2018-21)
Coordinateur adjoint du réseau européen **ETN NANOTRANS** (total 3.9M€, 2016-20)
Participant à l'action **COST NMR Relaxometry** (2016-20)
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 **DIADEM** (2022-25) – 650k€
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), **CELADYCT** (2012-16) et **BALWISE** (2019-23)
Ville de Paris *Porteur* du projet Emergence(s) "Energie bleue et désalinisation" (2016-19) – 250k€
IFP-En Thèses d'Alexandru Botan (2008-11) et Pauline Simonnin (2014-17) – 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 Louisfrema (2013-16) – 100k€
France-Berkeley Fund *Principal Investigator* avec D. Chandler (2012-13, 10k\$) et D. 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 millions (2018) et 3.5 millions (2019) d'heures sur Occigen ; 33.500 heures GPU sur Jean Zay (2021).

Administration de la recherche

Programme NEEDS (Nucléaire : Energie, Environnement, Déchets, Société) du CNRS : co-direction du Projet Fédérateur "Milieux Poreux" [2012-2018].
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. Ancien CSSI (Correspondant de Sécurité des Systèmes d'Information) [2013-2020] et 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" [2016-2018].
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].

Conseil scientifique du laboratoire Subatech (Nantes) [2019]

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 Charmmat, 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

Mai 2021 CECAM Workshop *Digital Prequel - Numerical Techniques for Nonequilibrium Steady States* (online)

Janvier 2020 Meeting en l'honneur de Loup Verlet à Paris.

Mai 2018 Journée Théorie, Modélisation et Simulation de la DCP, à Paris.

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 *GDRI Multiscale Materials Under the Nanoscope (M2UN)*

Décembre 2016 Journées annuelles de *NEEDS - Milieux Poreux*

Juillet 2016 CECAM-FR-MOSER 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

126 articles dont 1 *Nature Materials*, 2 *Nature Communications*, 1 *Nature Energy*, 1 *Ann. Rev. Phys. Chem.*, 1 *ACS Nano*, 2 *JACS*, 1 *Phys. Rev. X*, 5 *Phys. Rev. Lett.*, 1 *Angew. Chem. Int. Ed.*, 1 *ACS Cent. Sci.*, 2 *J. Phys. Chem. Lett.* (dont 1 perspective), 2 *J. Chem. Theory Comput.*, 1 *Soft Matter*, 1 *Faraday Discussion* (cover), 20 *J. Phys. Chem. B&C* (dont 1 cover), 22 *J. Chem. Phys.*, 5 *PCCP* (dont 2 perspectives), 3 *Geochim. Cosmochim. Acta*, 2 *Energy Storage Materials*

7 actes de congrès avec comité de lecture

6 chapitres d'ouvrages

37 conférences invitées (dont 4 keynotes)

14 autres communications orales et **18 posters** à des conférences

36 séminaires invités et **21 autres communications**

Liste des publications

REVUES INTERNATIONALES AVEC COMITÉ DE LECTURE

- [1] B. Rotenberg, R. Taïeb, V. Vénierd 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. Louisfremea, 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. Louisfremea, 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. Simonin, 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, Ca²⁺ - 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. Jeanmairet, 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. Louisfremea, 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. Jeanmairet, 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. Jeanmairet, B. Rotenberg, D. Borgis, M. Salanne, Study of a water-graphene capacitor with molecular density functional theory, *J. Chem. Phys.*, **151**, 124111 (2019).
- [102] T. Dufils, G. Jeanmairet, B. Rotenberg, M. Sprik, M. Salanne, Simulating electrochemical systems by combining the finite field method with a constant potential electrode, *Phys. Rev. Lett.*, **123**, 195501 (2019).
- [103] Z. Li, R. Bouchal, T. Mendez-Morales, A.-L. Rollet, C. Rizzi, S. Le Vot, F. Favier, B. Rotenberg, O. Borodin, O. Fontaine, M. Salanne, Transport Properties of Li-TFSI Water-in-Salt Electrolytes, *J. Phys. Chem. B*, **123**, 10514 (2019).
- [104] S. Coles, C. Park, R. Nikam, M. Kanduc, J. Dzubiella, B. Rotenberg, Correlation Length in Concentrated Electrolytes : Insights from All-Atom Molecular Dynamics Simulations, *J. Phys. Chem. B*, **124**, 1778 (2020).
- [105] A. Coretti, L. Scalfi, C. Bacon, B. Rotenberg, R. Vuilleumier, G. Ciccotti, M. Salanne, S. Bonella, Mass-zero constrained molecular dynamics for electrode charges in simulations of electrochemical systems, *J. Chem. Phys.*, **152**, 194701 (2020).
- [106] L. Scalfi, D.T. Limmer, A. Coretti, S. Bonella, P.A. Madden, M. Salanne, B. Rotenberg, Charge fluctuations from molecular simulations in the constant-potential ensemble, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 10480 (2020).
- [107] D. Lesnicki, C.Y. Gao, B. Rotenberg, D.T. Limmer, Field-dependent ionic conductivities from generalized fluctuation-dissipation relations, *Phys. Rev. Lett.*, **124**, 206001 (2020).
- [108] R. Bouchal, Z. Li, S.A. Freunberger, S. Le Vot, R. Berthelot, B. Rotenberg, F. Favier, M. Salanne, O. Fontaine, Competitive salt precipitation/dissolution during free-water reduction in water-in-salt electrolyte, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 15913 (2020).
- [109] E. Mangaud, B. Rotenberg, Sampling mobility profiles of confined fluids with equilibrium molecular dynamics simulations, *J. Chem. Phys.*, **153**, 044125 (2020).

- [110] A. Marin-Lafèche, M. Haefele, L. Scalfi, A. Coretti, T. Dufils, G. Jeanmairet, S. Reed, A. Serva, R. Berthin, C. Bacon, S. Bonella, B. Rotenberg, P. Madden, M. Salanne MetalWalls : A classical molecular dynamics software dedicated to the simulation of electrochemical systems, *J. Open Source Software*, **5**, 2373 (2020).
- [111] Y.-C. Lin, B. Rotenberg, J. Dzubiella, Structure and position-dependent properties of inhomogeneous suspensions of responsive colloids, *Phys. Rev. E*, **102**, 042602 (2020).
- [112] B. Rotenberg, Use the force ! Reduced variance estimators for densities, radial distribution functions and local mobilities in molecular simulations, *J. Chem. Phys.*, **153**, 150902 (2020).
- [113] L. Scalfi, T. Dufils, K.G. Reeves, B. Rotenberg, M. Salanne, A semiclassical Thomas-Fermi model to tune the metallicity of electrodes in molecular simulations, *J. Chem. Phys.*, **153**, 174704 (2020).
- [114] L. Challier, J. Lemarchand, C. Deanno, C. Jauzein, G. Mattana, G. Mériguet, B. Rotenberg, V. Noël, Printed Dielectrophoretic Electrode-based Continuous Flow Microfluidic Systems for particles 3D-Trapping, *Part. Part. Syst. Charact.*, **38**, 2000235 (2021).
- [115] L. Scalfi, B. Coasne, B. Rotenberg, On the Gibbs-Thomson equation for the crystallization of confined fluids, *J. Chem. Phys.*, **154**, 114711 (2021).
- [116] L. Scalfi, M. Salanne, B. Rotenberg, Molecular Simulation of Electrode-Solution Interfaces, *Ann. Rev. Phys. Chem.*, **72**, 189 (2021).
- [117] S.W. Coles, E. Mangaud, D. Frenkel, B. Rotenberg, Reduced variance analysis of molecular dynamics simulations by linear combination of estimators, *J. Chem. Phys.*, **154**, 191101 (2021).
- [118] D. Lesnicki, C.Y. Gao, D.T. Limmer, B. Rotenberg, On the molecular correlations that result in field-dependent conductivities in electrolyte solutions, *J. Chem. Phys.*, **155**, 014507 (2021).
- [119] A. Serva, L. Scalfi, B. Rotenberg, M. Salanne, Effect of the metallicity on the capacitance of gold – aqueous sodium chloride interfaces, *J. Chem. Phys.*, **155**, 044703 (2021).
- [120] Z. Zaafouri, G. Batôt, C. Nieto-Draghi, B. Rotenberg, D. Bauer, B. Coasne, Lattice Boltzmann method for adsorption under stationary and transient conditions : Interplay between transport and adsorption kinetics in porous media, *Phys. Rev. E*, **104**, 015314 (2021).
- [121] I. Chubak, L. Scalfi, A. Carof, B. Rotenberg, NMR Relaxation Rates of Quadrupolar Aqueous Ions from Classical Molecular Dynamics Using Force-Field Specific Sternheimer Factors, *J. Chem. Theory Comput.*, **17**, 6006 (2021).
- [122] G. Pireddu, L. Scalfi, B. Rotenberg, A molecular perspective on induced charges on a metallic surface, to appear in *J. Chem. Phys.*

REVUES NATIONALES (AVEC COMITÉ DE LECTURE)

- [123] B. Rotenberg, Physicochimie des interfaces chargées : modélisation multi-échelle et applications pour l'énergie, *L'Actualité Chimique*, **384**, 21 (2014).
- [124] M. Salanne, B. Rotenberg et P. Simon, Plus d'électricité dans les carbones, *La Recherche*, **491**, 52 (2014).
- [125] 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).
- [126] 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)

- [127] 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).
- [128] 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).
- [129] 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).
- [130] J.-F. Dufrêche, N. Malikova, M. Jardat, G. Mériguet, E. Dubois, B. Rotenberg, V. Marry, J. Molina et P. Turq, Experiments, Simulations, Theories : Multiscale approaches for solutions *Collection SFN*, **12**, 263-283 (2011).

- [131] 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).
- [132] 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).
- [133] B. Rotenberg, Modélisation : vecteur du dialogue entre recherche académique et industrie ? 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

- [134] B. Rotenberg et M. Cathelineau, Entreposage et Stockage in *L'Energie à Découvert*, p. 120, dir. C. Jeandel et R. Mosseri, CNRS Editions (2013).
- [135] 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).
- [136] 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).
- [137] P. Turq, B. Rotenberg, V. Marry and J.-F. Dufrêche, Ions in clays, *Encyclopedia of Applied Electrochemistry*, p. 1140, Springer (2014).
- [138] 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).
- [139] B. Rotenberg, M. Salanne et P. Simon Supercondensateurs : les sprinteurs du stockage de l'électricité, in *Étonnante Chimie*, p. 144, dir. C.-M. Pradier, F. Teyssandier et O. Parisel, CNRS Editions (2021).

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.
- [35] *Berkeley Statistical Mechanics Meeting*, Berkeley, Etats-Unis [01/2020]. "Use the Force !" Reduced Variance Estimators for Radial Distribution Functions, Generic 3D Densities and (Local) Transport Coefficients, B. Rotenberg.
- [36] *2nd International workshop on the Multi-Scale Modeling of Functional Interfaces and Soft Material*, Berlin, Allemagne [03/2020]. Influence of electrode metallicity in molecular simulations : a semi-classical Thomas-Fermi model, B. Rotenberg.
- [37] *CECAM Workshop "Memory Effects in Dynamical Processes : Theory and Computational Implementation"*, (online) [06/2021], Computing memory kernels from noise reconstruction by a deterministic approach, R. Vuilleumier and 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*, Castellana 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
- [32] *11th Liquid Matter Conference*, on-line [07/2021], **poster**, Blue energy and desalination with nanoporous carbon electrodes : capacitance from molecular simulations to continuous models, N. Ganfoud, M. Simoncelli, M. Salanne et B. Rotenberg

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]
- [34] Université de Bochum, Département de Chimie [11/2019]
- [35] Laboratoire Jacques-Louis Lions, Sorbonne Université [02/2020]
- [36] Duke University, Département de Chimie (en visio) [10/2020]

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]
- [19] Meeting annuel du réseau européen ETN NANOTRANS (Barcelone) [02/2020]
- [20] Réunion semestrielle du RS2E (visio) [10/2020]
- [21] Journée de lancement du livre "Étonnante Chimie" organisée par l'INC (Paris) [09/2021]