

Activités pédagogiques :

1. Présentation de l'activité d'enseignement :

Les disciplines dans lesquelles je dispense des enseignements relèvent aussi bien de la physique que de la chimie et concernent tous les niveaux universitaires (L1-M2) et au delà (écoles thématiques) et différents parcours (Sciences naturelles (L1), Physique et Chimie (L1-L2-L3), Sciences Physiques et Chimiques (L3, M1), Master Chimie option Chimie théorique (M1, M2 Erasmus Mundus), Master 2 Enseignement et Agrégation, Physique fondamentale (M2)).

En tant que monitrice en physique, j'ai tout d'abord dispensé des enseignements en électromagnétisme, mécanique quantique, mécanique classique, électronique et optique. En tant qu'enseignant chercheur en section 31, les enseignements dans lesquels j'interviens (ou suis intervenue) relèvent des deux disciplines chimie et physique (mécanique quantique, thermodynamique, théorie des groupes, liaison chimique, spectroscopie, chimie des solutions, chimie théorique avancée (méthodologie et applications) et magnétisme). J'ai eu l'opportunité de dispenser des cours internationaux de méthodologie du problème à N-corps quantiques ou sur certaines de mes thématiques de recherche (Corrélation et magnétisme) au master Erasmus Mundus TCCM, dans des écoles thématiques (Tunisie et France) et dans un institut de recherche à Nankin en Chine. Enfin, j'ai contribué à l'élaboration ou mis en place intégralement de nombreux fascicules de travaux dirigés, travaux pratiques, documents de cours et supports pour l'enseignement à distance.

Parmi les enseignements que je dispense, plusieurs sont des créations ex-nihilo. Ils correspondent soit à des synthèses de compétences sur plusieurs niveaux et parcours dans une discipline donnée (chimie théorique de l'agrégation, spectroscopie par exemple), soit à des synthèses de plusieurs disciplines pour aborder une thématique particulière (comme le magnétisme ou la corrélation électronique). Certains de ces cours mettent en jeu des connaissances très récentes et utilisent des outils actuellement employés par les chercheurs en chimie théorique. C'est le cas par exemple de l'unité d'enseignement « Composés et matériaux à propriétés électroniques remarquables » qui décrit des propriétés macroscopiques dont l'origine est quantique. Cet enseignement de 72 heures initialement (60 dans l'habilitation actuelle), mis en place en collaboration avec Nicolas Suaud, propose des travaux pratiques dans lesquels les étudiants utilisent des logiciels actuels tels que MOLCAS ou CASDI. Le cours intitulé : « Interactions Electroniques Fondamentales » (M2 physique) dont l'objectif est d'introduire le problème à N-corps quantiques est lui aussi une création originale, il traite de la corrélation électronique en physique et en chimie et permet aux étudiants de dériver et manier de nombreux hamiltoniens modèles couramment utilisés en physique (Hückel, Hubbard, tJ, double échange, Heisenberg, PPP) ainsi que le hamiltonien électronique exact et de comprendre la physique de la corrélation électronique en maîtrisant le contenu physique de ces hamiltoniens. Le cours de chimie théorique de l'agrégation de chimie est un cours très vaste qui couvre toutes les années universitaires (L1-M2), il rassemble des rudiments de mécanique quantique et d'atomistique, rappelle la théorie des groupes, traite la liaison chimique depuis les diagrammes d'orbitales moléculaires « à la main » jusqu'à Hückel en passant par les diagrammes de Walsh, les orbitales frontières, l'effet Jahn Teller, la théorie du champ de ligand et la théorie des fragments et s'attarde enfin sur différentes techniques spectroscopiques (UV-vis, IR). Ce cours s'attache aussi à approfondir et élargir les connaissances des étudiants en présentant les fondements de la spectroscopie, en particulier la dérivation et l'utilisation rigoureuse des hamiltoniens (vibration, rotation, hamiltonien de spin

et hamiltonien relativiste) tout en étayant leur culture chimique dans ce domaine (fluorescence, phosphorescence, laser, spectroscopie Auger, etc.).

La conception de ces enseignements et la réalisation des documents de cours et fascicules de TD et TP ont surtout été pour moi l'occasion de transmettre ma passion pour des disciplines que j'aime. Je suis de fait particulièrement inquiète par la précarité en France des formations à petits effectifs qui sont menacées de disparaître dans les prochaines habilitations. C'est non seulement la mise en péril de formations entières qui se profile mais aussi celle de disciplines de recherche par manque d'étudiants en master puis en thèse, ce qui à terme fragiliserait assurément la chimie théorique française...

2. Présentation synthétique des enseignements

Niveau : étudiants en thèse, post-doctorants, chercheurs.

- Cours de « Méthodologie et Magnétisme » Institute of Theoretical and Computational Chemistry (Nankin, Chine). Public : étudiants en thèses et chercheurs (2008)
- Cours de méthodologie intitulé « Corrélacion électronique » à l'Ecole de Chimie théorique de Carthage, Tunisie. Public : étudiants et Chercheurs (2006)

Niveau : M2, étudiants en thèse et post-doctorant.

- Cours de « Magnétisme » à l'école du Réseau Français des Chimistes Théoriciens RFCT, Public : étudiants en M2 (2011 à Dourdan).
- 2 cours de 2h + 1TD de 2h, 1 TP de 2h, 1 test automatisé avec correction intégrée de méthodologie intitulé « Multi-Reference Configuration Interaction », M2 Erasmus Mundus (TCCM). Public : étudiants en M2, en thèse et post-doctorants (2012-2013 Perugia, Italie et 2013-2014 Madrid, Espagne).
- Cours d'Interactions électroniques Fondamentales au M2 de Physique Fondamentale intitulé : Physique de la matière. Public : étudiants en M2 et en thèse (depuis 2004).
- Cours de Chimie Théorique(16h), TD (6h) et leçons (6h) de l'agrégation es sciences Physiques et Chimiques option Chimie et M2 enseignement. Public : agrégatifs et étudiants en M2 enseignement (depuis 2004).

Niveau : M1

- Cours de Composés et Matériaux à Propriétés Remarquables, M1 de Chimie spécialité Chimie théorique. Enseignement en présentiel (depuis 2004) et à distance (depuis 2011).
- Cours de Spectroscopie, M1 es Sciences Physiques et Chimiques (depuis 2011).
- Cours et TD de spectroscopie, M1 de Chimie Physique (de 2003 à 2005).

Niveau : L3

- Cours (10h) et TD (10h) de Théorie des Groupes en License 3 du parcours es Sciences Physiques et Chimiques. Public : étudiants en L3 (depuis 2011).
- TD de mécanique quantique(24h), TD de théorie des groupes(20h), TD de liaison chimique(24h) (de 1996 à 1999 puis de 2003 à 2005).
- TP d'atomistique, théorie des groupes, liaison chimique et spectroscopie (48h).

Niveau : L2 physique et physique et chimie

- TD et TP d'atomistique et de liaison chimique (24h) (de 2003 à 2008).
- TD de mécanique classique, TD d'électromagnétisme, TD de mécanique quantique (40 heures par an de 1992 à 1995)

Niveau : L1 Physique Chimie et L1 Sciences Naturelles

- TD d'atomistique (10h).
- TD de chimie des solutions (12h).
- TP de thermodynamique (24h) de 2005 à 2007.
- TP d'électronique et d'optique (36h) de 1992 à 1995.

Cours invités nationaux et internationaux :

- Cours de méthodologie de la corrélation à l'école de Carthage (2006).
- Cours de magnétisme à Nankin, Chine en juillet 2008.
- Cours de magnétisme à l'école du réseau français de Chimie Théorique (2011)
- Cours de méthodologie MRCI (2 cours, 1 TD, 1 TP et une évaluation) au master2 TCCM à l'université de Pérougia en septembre 2012.
- Cours de méthodologie MRCI (2 cours, 2 TD et une évaluation) au master 2 TCCM à l'université de Madrid en septembre 2013.

Direction de thèses et de post-doctorants :

- Direction de thèses : Roland Bastardis (2007), Corentin Boilleau (2011), Rémi Maurice (2011), Renaud Ruamps (2013), Vijay Gopal Chilkuri (date de soutenance prévue 2015).
- Co-encadrement d'étudiants en thèse sur des projets ponctuels : Mohammed Al Hajj, Tahra Ayed, David Taratiel, Zahra Tabookht
- Co-encadrement d'ATER : Tarha Ayed, Pierre Labèguerie, Corentin Boilleau

Etudiants en stage de DEA ou Master :

- **2000-2001** - Stage de DEA Physique de la matière : Benoît Bocquillon, collaboration avec Jean Paul Malrieu. Titre du mémoire : *Groupe de renormalisation dans l'espace réel avec interactions effectives- Applications aux systèmes de spin.*
- **2001-2002** - Stage de DEA Physique de la matière : Mohammad Al Hajj, collaboration avec Jean Paul Malrieu. Titre du mémoire de DEA : *Groupe de renormalisation dans l'espace réel avec interactions effectives : Application à des échelles de spin couplées.*
- **2005-2006** Stage de Master 2 Chimie option Chimie Physique : Marie Laure Bonnet, collaboration avec Nicolas Suaud. Titre du mémoire : *Etude de composés à effet LIESST.*
- **2006-2007** Stage de Master 2 Chimie option Chimie Physique : Florence Turpin, collaboration avec Nicolas Suaud. Titre du mémoire : *Etude de composés à transition de spin $Fe(phen)_2 NCS_2$.*
- **2006-2007** Stage de Master 2 Physique de la matière : Yohan Masaro, collaboration avec Nicolas Suaud. Titre du mémoire : *Modélisation des propriétés magnétiques du polyoxométallate $[GeV14O40]^{8-}$.*
- **2007-2008** Stage de Master 2 Chimie option Chimie Physique : Rémi Maurice, collaboration avec Coen de Graaf. Titre du mémoire : *Etude de l'anisotropie magnétique dans les complexes magnétiques.*
- **2007-2008** Stage de Master 1 Chimie option Chimie Physique : Ondrej Svoboda, collaboration avec Nicolas Suaud. Titre du mémoire : *Calculs de propriétés thermodynamiques d'aimants moléculaires à partir de hamiltoniens modèles.*
- **2008-2009** Stage de Master 1 Chimie option chimie théorique : Thibault Terencio, collaboration J.P. Malrieu. Titre du mémoire : *Comportement du couplage magnétique en fonction de la longueur du ligand pontant.*

- **2009-2010** Stage de Master 2 Chimie option chimie théorique : Thibault Terencio , collaboration N. Suaud. Titre du mémoire : *Analyse physique du couplage magnétique : mécanisme généralisé d'Anderson versus polarisation de spin.*
- **2010-2011** Stage de Master 1 Chimie option chimie théorique : Tim Krah, collaboration N. Benamor. Titre du mémoire : *Etude théorique de dérivés de bleu de Prusse.* Pourcentage d'encadrement 50%.
- **2011-2012** Stage de Master 2 Chimie option chimie théorique : Damien Serres, collaboration N. Benamor. Titre du mémoire : *Le phénomène de double échange dans les composés organiques.*
- **2012-2013** Stage de Master 2 Physique de la matière : Lionel Lacombe, collaboration N. Suaud. Titre du mémoire : *Interactions locales et hamiltoniens modèles dans NiGa₂S₄.*
- **2012-2013** Stage de Master 2 Chimie option chimie théorique : Julien Racine, collaboration H. Bolvin. Titre du mémoire : *Une liaison magnétique manganèse-manganèse problématique : spin S=1 ou S=3/2.*
- **2012-2013** Stage de Master 2 TCCM Erasmus mundus: Lalita Shaki, collaboration N. Suaud. Titre du mémoire : *Ab initio calculation of structure and properties of magnetic systems.*
- **2012-2013** Stage de Master 2 TCCM Erasmus mundus: Habiburrahman Zulfikri, collaboration H. Bolvin. Titre du mémoire : *Crystal field parameters in mononuclear Lanthanoids Sandwich complexes.*
- **2013-2014** Stage de Master 2 TCCM Erasmus mundus: Riccardo Alessandri, collaboration H. Bolvin. Titre du mémoire : *Crystal field parameters in mono- and bi-nuclear Lanthanoids complexes.*
- **2013-2014** Stage de Master 2 Chimie Université Paris Sud: Benjamin Cahier H. Collaboration Talal Mallah expérimentateur. Titre du projet : *Calculs des paramètres de Zero-Field Splitting dans des complexes mono-métalliques de cobalt.*
- **2013-2014** Stage de Master 2 TCCM Erasmus mundus: Sebastian Brickel, collaboration J.-P. Malrieu. Titre du projet : *Multireference Second-order perturbation theory.*
- **2013-2014** Stage de Master 2 Chimie option chimie théorique : Florian Koprowiak. Collaboration : N. Suaud. Titre du projet : *Origine de l'anisotropie dans des matériaux de Cobalt.*
- **2013-2014** Stage de Master 2 Physique de la matière : Barthélémy Pradines. Collaboration N. Suaud. Titre du projet : *Détermination des paramètres d'anisotropie dans le matériau NiGa₂S₄.*

Echanges d'étudiants :

- David Taratiel (3 mois) à l'université de Toulouse 3 Paul Sabatier (financement de l'université Rovira et Virgili de Tarragone, Espagne).
- Roland Bastardis (2 séjours de 3 mois) à l'Université de Tarragone, Espagne (financement ATUPS).
- Rémi Maurice (3 séjours de 5 mois) à l'Université de Tarragone, Espagne (financement ATUPS+ Co-tutelle).
- Renaud Ruamps (3 mois) à l'université de Tarragone, Espagne (Financement ATUPS)
- Zarha Tabbokht (3 mois) à l'université de Toulouse 3 Paul Sabatier (financement de l'université Rovira et Virgili de Tarragone, Espagne).
- Rémi Maurice (3 mois) à l'université de Groningen, Pays bas (financement de l'université de Groningen)
- Rémi Maurice (1 mois) à l'université de Bonn, Allemagne (financement de l'université de Bonn)