

Jérôme CUNY

Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques
IRSAMC, Université Paul Sabatier
118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex 4
E-mail jerome.cuny@irsamc.ups-tlse.fr

Date de naissance 16 Février 1984
Nationalité Français
Téléphone +(33) (0)5 61 55 68 36
Situation familiale pacsé, un enfant

Maître de Conférence au Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques

EXPERIENCES PROFESSIONNELLES

- 2020 **Habilitation à diriger les recherches** (Mars 2020, Université Paul Sabatier) : Etude théorique des propriétés physico-chimiques des systèmes aqueux : de la phase gaz à la phase condensée.
- 2016 - 2018 Accueil en **demi-délégation au CNRS** au LCPQ.
- 2012 - *maintenant* **Maître de Conférence** au Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques (LCPQ), UMR CNRS 5626, à l'Université Paul Sabatier.
- 2010 - 2012 **Post-Doctorant** à l'ETH Zürich dans le Department of Chemistry and Applied Biosciences au sein du groupe du Pr. M. Parrinello.
- 2008 - 2010 **Moniteur - allocataire de recherche** au sein du laboratoire «Sciences Chimiques de Rennes» UMR CNRS 6226 à l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes.
«*RMN du solide et modélisation : outils convergents pour le développement de nouveaux matériaux*»
- 2007 - 2008 **Vacataire - allocataire de recherche** au sein du laboratoire «Sciences Chimiques de Rennes» UMR CNRS 6226 à l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes.
«*RMN du solide et modélisation : outils convergents pour le développement de nouveaux matériaux*»

FORMATION ET DIPLÔMES

- 2007 - 2010 **Doctorat de l'Université de Rennes 1 mention Chimie** (mention Très Honorable) réalisé sous la direction de R. Gautier et L. Le Pollès au sein du laboratoire «Sciences Chimiques de Rennes», UMR CNRS 6226.
Thèse soutenue le 24 septembre 2010 à l'ENSCR devant le jury composé de : D. Massiot, R. Poteau, J.-F. Halet, L. Delevoye, L. Le Pollès, R. Gautier, P. Gougeon et C. J. Pickard
«*RMN du solide et modélisation : outils convergents pour le développement de nouveaux matériaux*»
- 2007 **Master 2 recherche mention «Chimie du solide et des matériaux»** option Chimie Théorique de l'Université de Rennes 1 (classé 2nd/22 mention Bien).
- 2004 - 2007 **Elève-Ingénieur** de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes (France). Diplôme obtenu en 2007.

PUBLICATIONS SCIENTIFIQUES

- Inner-Shell Excitation of Gas Phase Carbonates and α,γ -dicarbonyl Compounds*
R. Lessard, **J. Cuny**, G. Cooper, A. P. Hitchcock
Chem. Phys. **2007**, *331*, 289-303
- DFT Calculations of Quadrupolar Solid-State NMR Properties. Some Examples in Solid-State Inorganic Chemistry*
J. Cuny, S. Messaoudi, V. Alonzo, E. Furet, J.-F. Halet, E. Le Fur, S. E. Ashbrook, C. J. Pickard, R. Gautier, L. Le Pollès
J. Comput. Chem. **2008**, *29*, 2279-2287
- Redetermination of $Zn_2Mo_3O_8$*
J. Cuny, P. Gougeon, P. Gall
Acta Cryst. **2009**, *E65*, i51
- Synthesis, Electronic and Crystal Structures, and Physical Studies of the Superconductor $Cs_{-1}Mo_{12}S_{14}$, Final Step of the Condensation of the $Mo_6L_8L_6^a$ Unit*
P. Gougeon, D. Salloum, **J. Cuny**, L. Le Pollès, M. Le Floch, R. Gautier, M. Potel
Inorg. Chem. **2009**, *48*, 8337-8341
- Density Functional Theory Calculations of ^{95}Mo NMR Parameters in Solid-State Compounds*
J. Cuny, E. Furet, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J.-B. d'Espinose de Lacaillerie
ChemPhysChem. **2009**, *10*, 3320-3329
- Improving Sensitivity and Resolution of MQMAS Spectra: A ^{45}Sc Case Study of Scandium Sulphate Pentahydrate*
C. V. Chandran, **J. Cuny**, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, T. Bräuniger
J. Magn. Reson. **2010**, *203*, 226-235
- Electric Field Gradient Calculations in Paramagnetic Compounds Using the PAW Approach. Application to ^{23}Na NMR in Layered Vanadium Phosphates*
J. Cuny, J. R. Yates, R. Gautier, E. Furet, E. Le Fur, L. Le Pollès
Magn. Reson. Chem. **2010**, *48*, S171-S175
- High-Temperature Experimental and Theoretical Study of Magnetic Interactions in Diamond and Pseudo-Diamond Frameworks Built up from Hexanuclear Tantalum Clusters*
B. Peric, S. Cordier, **J. Cuny**, R. Gautier, T. Guizouarn, P. Planinic
Chem.--Eur. J. **2011**, *17*, 6263
- ^{95}Mo nuclear magnetic resonance parameters of molybdenum hexacarbonyl from density functional theory: appraisal of computational and geometrical parameters*
J. Cuny, K. Sykina, B. Fontaine, L. Le Pollès, C. J. Pickard, R. Gautier
Phys. Chem. Chem. Phys. **2011**, *13*, 19471-19479
- Exploring the free energy surfaces of clusters using reconnaissance metadynamics*
G. A. Tribello, **J. Cuny**, H. Eshet, M. Parrinello
J. Chem. Phys. **2011**, *135*, 114109
- Synthesis, Crystal and Electronic Structures, and Magnetic Properties of the $LiLn_9Mo_{16}O_{35}$ ($Ln = La, Ce, Pr, \text{ and } Nd$) Compounds Containing the Original Cluster $Mo_{16}O_{36}$*
P. Gougeon, P. Gall, **J. Cuny**, R. Gautier, L. Le Pollès, L. Delevoye, J. Trébosc
Chem.--Eur. J. **2011**, *17*, 13806-13813
- The Fuzzy Quantum Proton in the Hydrogen Chloride Hydrates*
A. A. Hassanali, **J. Cuny**, M. Ceriotti, C. J. Pickard, M. Parrinello
J. Am. Chem. Soc. **2012**, *134*, 8557-8569
- ^{95}Mo Solid-State Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and Quantum Simulations : Synergetic Tools for the Study of Molybdenum Cluster Materials*
J. Cuny, S. Cordier, C. Perrin, C. J. Pickard, L. Delevoye, J. Trébosc, Z. Gan, L. Le Pollès, R. Gautier
Inorg. Chem. **2013**, *52*, 617-627
- Synthesis, crystal and electronic structures and magnetic properties of $Li_2SnMo_3O_8$: A novel reduced molybdenum oxide containing Mo_3O_{13} cluster units*
P. Gall, R. Al Rahal Al Orabi, T. Guizouarn, **J. Cuny**, B. Fontaine, R. Gautier, P. Gougeon
J. Solid State Chem. **2013**, *201*, 312-316
- Shape Modulation of Octanuclear Cu(I) or Ag(I) Dichalcogeno Template Clusters with Respect to the Nature of their Encapsulated Anions: A Combined Theoretical and Experimental Investigation*
C. Latouche, S. Kahlal, E. Furet, P.-K. Liao, Y.-R. Lin, C.-S. Fang, **J. Cuny**, C. W. Liu, J.-Y. Saillard
Inorg. Chem. **2013**, *52*, 617-627
- Proton transfer through the water gossamer*
A. A. Hassanali, F. Giberti, **J. Cuny**, T. D. Kühne, M. Parrinello
PNAS **2013**, *110*, 13723-13728
- Nuclear quantum effects and hydrogen bond fluctuations in water*

- M. Ceriotti, **J. Cuny**, M. Parrinello, D. E. Manolopoulos
PNAS **2013**, *110*, 15591-15596
18. *Aqueous solutions: state of the art in ab initio molecular dynamics*
A. A. Hassanali, **J. Cuny**, V. Verdolino, M. Parrinello
Phil. Trans. R. Soc. A **2014**, *372*, 20120482
 19. *Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Mechanism of Proton Recombination with a Weak Base*
J. Cuny, A. A. Hassanali
J. Phys. Chem. B **2014**, *118*, 13903-13912
 20. *Phase changes of the water hexamer and octamer in the gas phase and adsorbed on polycyclic aromatic hydrocarbons*
L. F. L. Oliveira, **J. Cuny**, M. Morinière, L. Dontot, A. Simon, F. Spiegelman, M. Rapacioli
Phys. Chem. Chem. Phys. **2015**, *17*, 17079-17089
 21. *Evaluation of ^{95}Mo Nuclear Shielding and Chemical Shift of $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]^{2-}$ Clusters in the Liquid Phase*
T. T. Nguyen, J. Jung, X. Trivelli, J. Trébosc, S. Cordier, Y. Molard, L. LePollès, C. J. Pickard, **J. Cuny**, R. Gautier
Inorg. Chem. **2015**, *54*, 7673-7683
 22. *Combined theoretical and time-resolved photoluminescence investigations of $[\text{Mo}_6\text{Br}_8\text{Br}^a_6]^{2-}$ metal cluster units: evidences of dual emission*
K. Costuas, A. Garreau, A. Bulou, B. Fontaine, **J. Cuny**, R. Gautier, M. Mortier, Y. Molard, J.-L. Duvail, E. Faulques, S. Cordier
Phys. Chem. Chem. Phys. **2015**, *17*, 28574
 23. *Cationic Methylene-Pyrene Isomers and Isomerization Pathways: Finite Temperature Theoretical Studies*
M. Rapacioli, A. Simon, C. Marshall, **J. Cuny**, D. Kokkin, F. Spiegelman, C. Joblin
J. Phys. Chem. A **2015**, *119*, 12845-12854
 24. *Ab-initio Quality NMR Parameters in Solid-State Materials using a High-Dimensional Neural-Network Representation*
J. Cuny, Y. Xie, C. J. Pickard, A. A. Hassanali
J. Chem. Theory Comput. **2016**, *12* (2), 765-773
 25. *Benchmarking DFTB for Silver and Gold Materials: From Small Clusters to Bulk*
L. F. L. Oliveira, N. Tarrat, **J. Cuny**, J. Morillo, D. Lemoine, F. Spiegelman, M. Rapacioli
J. Phys. Chem. A **2016**, *120*, 8469-8483
 26. *Structural Characterisation of Sulfur-Containing Water Clusters Using a Density-Functional Based Tight-Binding Approach*
K. A. Korchagina, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman, **J. Cuny**
J. Phys. Chem. A **2016**, *120*, 9089-9100
 27. *Keto-polymethines: a versatile class of dyes with outstanding spectroscopic properties for in cellulose and in vivo two-photon microscopy imaging*
S. Pascal, S. Denis-Quanquin, F. Appaix, A. Duperray, A. Grichine, B. Le Guennic, D. Jacquemin, **J. Cuny**, S.-H. Chi, J. W. Perry, B. van der Sanden, C. Monnereau, C. Andraud, O. Maury
Chem. Sci. **2017**, *8*, 381-394
 28. *Metadynamics combined with Auxiliary Density Functional and Density Functional Tight Binding Methods: Alanine Dipeptide as a Case Study*
J. Cuny, K. Korchagina, C. Menakbi T. Mineva
J. Mol. Model., **2017**, *23*, 71
 29. *Global Optimization of Neutral and Charged 20- and 55-Atom Silver and Gold Clusters at the DFTB Level*
N. Tarrat, M. Rapacioli, J. Cuny, J. Morillo, F. Spiegelman
Comp. Theor. Chem., **2017**, *1107*, 102-114
 30. *Pesticide interaction with environmentally important cations: A molecular dynamics and DFT study of metamitron and fenhexamid*
B. Belzunces, S. Hoyau, **J. Cuny**, F. Bessac
Comp. Theor. Chem., **2017**, *1117*, 220-234.
 31. *Theoretical Investigation of the Solid-Liquid Phase Transition in Protonated Water Clusters*
K. Korchagina, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman, J.-M. L'Hermite, I Braud, S. Zamith, **J. Cuny**
PCCP, **2017**, *19*, 27288-27298.
 32. *Molecular Dynamics Study of the Collision-Induced Reaction of H with CO on Small Water Clusters*
K. Korchagina, F. Spiegelman, **J. Cuny**
J. Phys. Chem. A, **2017**, *121*, 9485-9494.
 33. *Conformational Study and Chiroptical Properties of Chiral Dimethyl- Ethylenedithio-Tetrathiafulvalene (DM-EDT-TTF)*
T. Cauchy, F. Pop, **J. Cuny**, N. Avarvari
Chimia, **2018**, *72*, 1-5.
 34. *Density-functional tight-binding approach for metal clusters, nanoparticles, surfaces and bulk: application to silver and gold*
J. Cuny, N. Tarrat, F. Spiegelman, A. Huguenot, A. Rapacioli
J. Phys.: Condens. Matter, **2018**, *30*, 30.

35. *Metal Atom Clusters as Building Blocks for Multifunctional Proton-Conducting Materials: Theoretical and Experimental Characterization*
G. Daigre, **J. Cuny**, P. Lemoine, M. Amela-Cortes, S. Paofai, N. Audebrand, A. Le Gal La Salle, E. Quarez, O. Joubert, N. G. Naumov, S. Cordier
Inorg. Chem., **2018**, *57*, 9814–9825.
36. *Evaluation of Gas-to-Liquid ¹⁷O Chemical Shift of Water: A Test Case for Molecular and Periodic Approaches*
J. Cuny, F. Jolibois, I. C. Gerber
J. Chem. Theory Comput., **2018**, *14*, 4041-4051
37. *Selective assembly of Molybdenum Clusters into Nanomaterials and Nanocapsules*
F. Sciortino, **J. Cuny**, F. Grasset, C. Lagrost, P. Lemoine, A. Moréac, Y. Molard, T. Takei, S. Cordier, S. Chevance, F. Gauffre
ChemComm, **2018**, *54*, 13387-13390.
38. *Contribution of the Density-Functional based Tight-Binding Scheme to the Description of Water Clusters : Methods, Applications and Extension to Bulk Systems*
A. Simon, M. Rapacioli, E. Michoulier, L. Zheng, K. Korchagina, **J. Cuny**
Mol. Sim., **2019**, *45*, 249-268
39. *Size-Dependent Proton Localization in Hydrated Uracil Clusters: A Joint Experimental and Theoretical Study*
I. Braud, S. Zamith, **J. Cuny**, L. Zheng, J.-M. L'Hermite
J. Chem. Phys., **2019**, *150*, 014303
40. *Molecular Simulations with in-deMon2k QM/MM, a Tutorial-Review*
A. de la Lande, A. Alvarez-Ibarra, K. Hasnaoui, F. Cailliez, X. Wu, T. Mineva, **J. Cuny**, P. Calaminici, L. López-Sosa, G. Geudtner, I. Navizet, C. G. Iriepa, D. R. Salahub, A. M. Köster
Molecules, **2019**, *24*, 1653
41. *Density-functional tight-binding: basic concepts and applications to molecules and clusters*
F. Spiegelman, N. Tarrat, J. Cuny, L. Dontot, E. Posenitskiy, C. Marti, A. Simon, M. Rapacioli
Advances in Physics: X, **2020**, *5(1)*, 1710252.

CHAPITRES D'OUVRAGE

1. *First-Principles Computation of NMR Parameters in Solid-State Chemistry*
J. Cuny, R. Gautier, J.-F. Halet
Handbook of Solid State Chemistry, Volume 5 - Theoretical Description, **2017**, Wiley-VCH

COMMUNICATIONS PAR AFFICHE

1. *Electronic Structure Analysis of New Molybdenum Oxide Cluster Compounds*
J. Cuny, L. Le Pollès, P. Gall, R. Gautier, P. Gougeon
International Workshop on Transition Metal Clusters, Rennes (France), juillet 2008
2. *Combined High Field ⁹⁵Mo Solid State NMR and DFT Calculated Electric Field Gradients as a Tool for Cluster Science*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
International Workshop on Transition Metal Clusters, Rennes (France), juillet 2008
3. *Calculs DFT de paramètres de RMN du ⁹⁵Mo par une approche périodique*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye, J. B. d'Espinose de Lacaillerie
11^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Dinard (France), juillet 2008
4. *Validation of Projector Augmented-Wave Methods for the Calculation of NMR Properties of Molybdenum*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye, J. B. d'Espinose de Lacaillerie
14th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, Trieste (Italie), janvier 2009
5. *⁹⁵Mo Solid-State NMR Study of Transition Metal Cluster Compounds: A Synergic Experimental and Computational Approach*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
EUROMAR 2009, Göteborg (Suède), juillet 2009
6. *Validation of Projector Augmented-Wave Methods for the Calculation of NMR Properties of Molybdenum*
J. Cuny, K. Sykina, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J.

- Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
13th International Conference on the Application of Density Functional Theory in Chemistry and Physics. DFT09, Lyon (France), septembre 2009
- Evidence and Characterisation of Nuclear Quantum Effects in Condensed Matter*
J. Cuny, A. A. Hassanali, M. Ceriotti, M. Deschamps, M. Parrinello
CPMD 2013, Leipzig (Allemagne), septembre 2013
 - Evidence and Characterisation of Nuclear Quantum Effects in Condensed Matter*
J. Cuny, A. A. Hassanali, M. Ceriotti, M. Deschamps, M. Parrinello
ICAMM 2014, Nantes (France), Juillet 2014
 - Application de l'approche SCC-DFTB pour l'étude des interactions CO-X (X=H₂O, H⁺, H₃O⁺)*
K. Korchagina, J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
14^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Paris (France), Juillet 2014
 - Molecular dynamics study of the H and CO recombination on small water clusters*
K. Korchagina, J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
Molecular Dynamics Summer School: The Computer Simulation of Condensed Phases
 - "CCP5", Manchester (Royaume-Uni), Juillet 2015*
 - Influence de la nature d'espèces sulfurées sur les propriétés physico-chimiques de clusters de molécules d'eau*
K. Korchagina, J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
15^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, Lyon (France), Juillet 2016
 - New functionalities of deMon2k for user-friendly QM/MM simulations*
A. de la Lande, T. Mineva, **J. Cuny**
deMon Workshop 2019, Frejus (France), Mai 2019
 - Synchronous and Asynchronous implementation of the Parallel-Tempering Molecular Dynamics method in the codes deMonNano and deMon2k*
F. Louisnard, A. Simon, J. Cuny
TOUCAM 2019, Toulouse (France), 7-8 Novembre 2019

COMMUNICATIONS ORALES

- Calculs DFT de paramètres de RMN du ⁹⁵Mo par une approche périodique*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Journée de travail du réseau RMN structurale dans le Grand Bassin Parisien, Rennes (France), juin 2008
- DFT Investigations of the Structural and Physical Properties of New Solid-State Transition Metal Cluster Compounds*
J. Cuny, B. Fontaine, S. Cordier, R. Gautier, P. Gougeon, J.-F. Halet, L. Le Pollès, C. Perrin, C. J. Pickard
International Symposium on Structure-Property Relationships in Solid State Materials, Nantes (France), juillet 2008
- Solid-state NMR and DFT calculations: A Combined Tool for the Study of Transition Metal Compounds*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
16th International Conference on Solid Compounds of transition Elements, Dresden (Allemagne), juillet 2008
- RMN du solide et modélisation : outils convergents pour le développement de nouveaux matériaux*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Journées Scientifiques de la Société Chimique de France Section Bretagne - Pays de la Loire, Trégastel (France), mai 2009
- Etude de composés à clusters de molybdène par une approche combinée calculs quantiques et RMN ⁹⁵Mo en phase solide*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Journée de travail du réseau RMN structurale dans le Grand Bassin Parisien, Caen (France), juin 2009

6. *Solid State NMR and DFT Calculations: A Combined Tool for the Study of Transition Metal Materials*
J. Cuny, L. Le Pollès, **R. Gautier**, C. J. Pickard, L. Delevoye, J. Trebosc
6^{ème} rencontre franco-espagnole sur le chimie et la physique de l'état solide, Tarragona (Espagne), mars 2010
7. *RMN du solide et modélisation : outils convergents pour le développement de nouveaux matériaux*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Journée des doctorants de l'UMR 6226, Université Rennes 1, Rennes (France), mai 2010
8. *Apport du calcul quantique à l'étude RMN du solide de composés inorganiques de l'état solide*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard
12^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones, FUNDP, Namur (Belgique), juillet 2010
9. *⁹⁵Mo Solid-State NMR Study of Transition Metal Cluster Compounds: A Synergetic Experimental and Computational Approach*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, J. Trebosc, L. Delevoye, C. J. Pickard,
52nd Rocky Mountain Conference on analytical Chemistry, Snowmass Colorado (USA), août 2010
10. *Transition Metal Cluster Compounds Studied by a Combined ⁹⁵Mo Solid-State NMR and DFT Approach*
J. Cuny, B. Fontaine, S. Cordier, P. Gall, **R. Gautier**, P. Gougeon, J.-F. Halet, L. Le Pollès, Y. Molard, C. Perrin, M. Potel, C. J. Pickard
2nd International Workshop on Transition Metal Clusters, Rostock (Allemagne), septembre 2010
11. *Calcul quantique et réseau de neurones, nouvelle approche pour l'étude RMN en température de systèmes amorphes complexes*
J. Cuny, Y. Xue, A. A. Hassanali, C. J. Pickard, M. Parrinello
Journée de travail du réseau RMN structurale dans le Grand Bassin Parisien, Rennes (France), janvier 2012
12. *Application of Machine Learning Algorithms to the study of atomic and molecular aggregates*
J. Cuny, G. A. Tribello, M. Parrinello
CECAM Workshop on Machine Learning in Atomistic Simulations, Lugano (Suisse), septembre 2012
13. *Mise en évidence et caractérisation des effets quantiques nucléaires en phase condensée*
J. Cuny, A. A. Hassanali, M. Ceriotti, M. Deschamps, M. Parrinello
GDR CoDFT 2013, Guidel Plages (France), mai 2013
14. *New Molecular Dynamics Approaches to Model Activated Processes and Nuclear Quantum Effects: Implementation in the deMon-nano Code*
J. Cuny
deMon Workshop 2013, Toulouse (France), juin 2013
15. *Développements et utilisation de la méthode Density Functional based Tight-Binding pour la simulation moléculaire*
J. Cuny, F. Spiegelman, A. Scemama, M. Rapacioli, A. Simon, L. Dontot, L. Oliveira, K. Korchagina
82^e Congrès de l'Acfas, Montréal (Canada), Mai 2014
16. *Implementation in deMon-nano of new thermostats based on stochastic equations of motion: application to the simulation of heat capacity curves and liquid water*
J. Cuny, M. Rapacioli, A. Simon, F. Spiegelman
deMon Workshop 2015, Sofia (Bulgarie), Mai 2015
17. *Structural, dynamical and thermodynamical properties of ion-containing water clusters*
K. Korchagina, J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
deMon Workshop 2015, Sofia (Bulgarie), Mai 2015
18. *Propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques de clusters de molécules d'eau*
J. Cuny, K. Korchagina, L. F. Oliveira, M. Rapacioli, A. Simon, F. Spiegelman
Journées Dynamiques du Sud-Ouest 2015, Toulouse (France), Juin 2015
19. *Etude par dynamique moléculaire de la recombinaison de H et CO à la surface de clusters d'eau*
K. Korchagina, J. Cuny et F. Spiegelman
GDR EMIE – Réunion plénière 2015, Biarritz (France), Mai-Juin 2015
20. *Caractérisation structurale, thermodynamique et dynamique des agrégats de molécules d'eau contenant des espèces sulfurées*
K. Korchagina, J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
TouCAM 2015 – Toulousaines du Calcul Atomique

et Moléculaire, Toulouse (France), Novembre 2015

21. *First steps towards the implementation of metadynamics and path-integral molecular dynamics in deMon2k*
J. Cuny and Tzonka Mineva
deMon Workshop 2016, Zhengzhou (China), May 2016
22. *Structure and Reactivity of Octahedral Molybdenum Clusters in Aqueous Solution Probed by Molecular Dynamics*
J. Cuny, X. Trivelli, S. Cordier, Y. Molard, R. Gautier
CLUSPOM-1, Rennes (France), Juin-Juillet 2016
23. *Molecular Dynamics Study of the Structure and Reactivity of Ruthenium Polypyridine Complexes in Aqueous Solution*
J. Cuny, A. J. Göttle, I. M. Dixon, F. Alary
42nd International Conference on Coordination Chemistry (ICCC 2016), Brest (France), 3-8 Juillet 2016
24. *Transition Metal Clusters as Building Blocks for Multifunctional Proton-Conducting Materials*
G. Daigre, **J. Cuny**, P. Lemoine, M. Amela-Cortes, S. Paofai, N. Audebrand, A. le Gal La Salle, E. Quarez, O. Joubert, N. G. Naumov, S. Cordier
International Workshop on Transition Metal Clusters, Tübingen (Allemagne), 5-7 Septembre 2018
25. *Transition Metal Clusters as Building Blocks for Multifunctional Proton-Conducting Materials*
G. Daigre, **J. Cuny**, P. Lemoine, M. Amela-Cortes, S. Paofai, N. Audebrand, A. le Gal La Salle, E. Quarez, O. Joubert, N. G. Naumov, S. Cordier

19th Solid State Protonic Conductors, Stowe (Vermont U.S.A), 16-21 Septembre 2018

26. *Développements et applications de l'approche SCC-DFTB pour la chimie atmosphérique*
J. Cuny K. Korchagina, M. Rapacioli, F. Spiegelman et A. Simon
Atelier Conjoint des GDRs Suie et EMIE, Université de Lille, 31 Mai - 1 Juin 2018
27. *Size-Dependent Proton Localization in Hydrated Uracil Clusters: a Joint Experimental and Theoretical Study*
I. Braud, S. Zamith, J. Cuny, **L. Zheng**, J.-M. L'Hermite
GDR EMIE - Réunion plénière 2018, Nouan-le-Fuzelier (France), 12-15 Novembre 2018
28. *Parallel-Tempering Path-Integral Molecular Dynamics Approach to Water Clusters Simulations*
F. Louisnard, A. Simon, J. Cuny
deMon Workshop 2019, Frejus (France), Mai 2019
29. *Size-dependent proton localization in hydrated uracil clusters*
L. Zheng, M. Rapacioli, F. Louisnard, I. Braud, S. Zamith, J.-M. L'Hermite, J. Cuny
TOUCAM 2019, Toulouse (France), 7-8 Novembre 2019
30. *Synchronous and Asynchronous implementation of the Parallel-Tempering Molecular Dynamics method in the codes deMonNano and deMon2k*
F. Louisnard, A. Simon, J. Cuny
TOUCAM 2019, Toulouse (France), 7-8 Novembre 2019

SEMINAIRES INVITES et TUTORIELS

1. *First-Principles Calculations of ⁹⁵Mo NMR Parameters in Insulating Diamagnetic Solid-State Compounds*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Workshop NMR spectroscopy and electronic structure calculations, Dresden (Allemagne), mars 2009
2. *Solid State ⁹⁵Mo NMR and Modelling: Converging Tools for New Material Development*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye

Magnetic Resonance Seminar, St. Andrews (Angleterre), février 2010

3. *Solid State ⁹⁵Mo NMR and Modelling: Converging Tools for the Development of New Materials*
J. Cuny, L. Le Pollès, R. Gautier, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Equipe de M. Parrinello, ETH, Lugano (Suisse), mars 2010
4. *⁹⁵Mo Solid-State NMR Study of Transition Metal Cluster Compounds: A Synergetic Experimental and Computational Approach*

- J. Cuny**, R. Gautier, L. Le Pollès, C. J. Pickard, J. Trebosc, L. Delevoye
Séminaire Groupement Scientifique RMN - Nord Pas de Calais, Université Lille 1, Lille (France), juillet 2010
5. *Dynamique moléculaire, metadynamics et RMN en phase solide : approches convergentes pour l'étude de différentes problématiques chimiques*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, Y. Xue, A. A. Hassanali, C. J. Pickard, M. Parrinello
Equipe UCCS, Université de Lille 1, Lille (France), février 2012
 6. *Dynamique moléculaire, metadynamics et RMN en phase solide : approches convergentes pour l'étude de différentes problématiques chimiques*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, Y. Xue, A. A. Hassanali, C. J. Pickard, M. Parrinello
CEMHTI-CNRS, Orléans (France), février 2012
 7. *Applications de la dynamique moléculaire et de la metadynamics aux aspects dynamiques des propriétés RMN et à la réactivité en solution*
J. Cuny, R. Gautier, L. Le Pollès, Y. Xue, A. A. Hassanali, C. J. Pickard, M. Parrinello
Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes 1, Rennes (France), mars 2012
 8. *Metadynamics : principes, utilisation et applications à l'étude de composés à clusters de métaux de transition*
J. Cuny, R. Gautier, S. Cordier, Y. Molard, X. Trivelli
Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes 1, Rennes (France), février 2013
 9. *Metadynamics and Path-Integral Molecular Dynamics, Two Theoretical Approaches to Study Hydrogen Reactivity in the Interstellar Medium*
J. Cuny, G. Tribello, M. Ceriotti, M. Deschamps, M. Parrinello
Atelier H₂/Grains de l'AST Molécules et Grains, Toulouse (France), avril 2013
 10. *Density-Functional based Tight-Binding : application à la description dynamique et thermodynamique des systèmes chimiques*
J. Cuny, L. Dontot, M. Rapacioli, A. Simon, L. Oliveira, K. Korchagina, F. Spiegelman
Sciences Chimiques de Rennes, Université de Rennes 1, Rennes (France), avril 2014
 11. *SCC-DFTB Modelling of the Carbonyl-Hydrogen Recombination on Water Aggregates: Toward the Formation of Complex Oxygenated Molecules*
K. Korchagina, **J. Cuny**, A. Simon, M. Rapacioli, F. Spiegelman
NANOCOSMOS Theoreticians Meeting 2015, Toulouse (France), Decembre 2015
 12. *Utilisation de l'approche self-consistent-charge density-functional based tight-binding (SCC-DFTB) pour la modélisation de processus astrochimiques*
J. Cuny, A. Simon, M. Rapacioli, K. Korchagina, F. Spiegelman
LAMPS, Perpignan (France), Mars 2016
 13. *Enhanced Sampling Methods for Improving Molecular Dynamics Simulations*
J. Cuny
deMon2k and deMonNano Tutorial, Zhengzhou (China), May 2016
 14. *Contribution of DFT and DFTB Methods to the Description of Aqueous Systems from Water Clusters to Condensed Matter Systems*
J. Cuny et K. Korchagina
Journée des Jeunes Chercheurs, Département de Chimie - Ecole Polytechnique, Janvier 2017
 15. *Exploration of Potential Energy Surfaces - Molecular Dynamics*
J. Cuny
TCCM Winter School 2017-2019, Tutorials in Theoretical Chemistry, Luchon (France), January 2017-2019
 16. *Contribution of the DFTB Method to Describe Aqueous Systems: From Water Clusters to Condensed Matter Systems*
J. Cuny, K. Korchagina, M. Rapacioli, F. Spiegelman, A. Simon
ICTP - Condensed Matter Section Seminar, Trieste (Italie), Novembre 2018
 17. *Contribution of the DFTB Method to Describe Aqueous Systems: From Water Clusters to Condensed Matter Systems*
J. Cuny, K. Korchagina, M. Rapacioli, F. Spiegelman, A. Simon
Queen's University, Belfast (Irlande), Février 2020

ENCADREMENT D'ETUDIANTS

ETUDIANTS EN THÈSE

- **Thi Thuong Nguyen (2011-2015)** Doctorat : "Calculs quantiques de paramètres RMN en phase solide de métaux de transition dans des composés inorganiques" (Co-encadrant de thèse).
- **Kseniia Korchagina (2013-2016)** Doctorat : "Etude par dynamique moléculaire des propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques d'agrégats moléculaires" (Co-directeur de thèse, 50%).
- **Carles Marti Aliod (2015-2018)** Doctorat: "Networked Computing for ab initio modeling the chemical storage of alternative energy » (Co-directeur de thèse, 20%).
- **Linjie Zheng (2017-2021)** Doctorat : "Excited States and Solvatochromism Properties of Large Organic Molecules: from *in vivo* cell imaging to dye-sensitized solar cells" (Directeur de thèse).
- **Fernand Louisnard (2018-2021)** Doctorat : "Exploration de paysages énergétiques et effets quantiques nucléaires : approche Parallel-Tempering Path-Integral Molecular Dynamics" (Co-directeur de thèse, 50%).
- **Nicolas Cinq (2019-2022)** Doctorat: "Modélisation par dynamique moléculaire de l'influence d'impuretés moléculaires sur les interfaces eau-(solvant/hydrate de gaz)" (Co-directeur de thèse, 50%)

ETUDIANTS DE MASTER

- **Maxime Morinière (2013)** Stage de Master 2 : "Etude par dynamique moléculaire *ab initio* de l'addition d'hydrogène sur le monoxyde de carbone dans des agrégats d'eau" (Encadrant).
- **Arthur Huguenot (2016)** Stage de Master 1 : "Propriétés structurales, dynamiques et thermodynamiques d'agrégats de molécules de méthanol" (Encadrant).
- **Fernand Louisnard (2017)** Stage de Master 1 : "Computational Study of Water Clusters containing Ammoniac and Ammonium" (Encadrant).
- **Kanishka Singh (2019)** Stage de Master 2 : "Reactive Potential Energy Surfaces: Fitting with Gaussian Process Regression" (Co-encadrant).
- **Azahara Doncel (2020)** Stage de Master 2 : "Computational strategies to estimate the self-assembly free energy in supramolecular polymers" (Co-encadrant).

ETUDIANTS DE LICENCE

- **Fernand Louisnard, Mélani Centenero, Matilda Delgado, Maxime Ferrer, Amélie Icher, Mélissa Bonnet,** Stages de L2 Parcours Spéciaux.

DISTINCTIONS

- Lauréat du Prix Gineste de Chimie 2011, prix décerné par la Fondation de l'université de Rennes 1
- Récipiendaire de la PEDR 2016-2020 (prime d'encadrement doctoral et de recherche)

CO-ORGANISATION DE RENCONTRES SCIENTIFIQUES

- DeMon Workshop 2013, Toulouse, France
- TCCM Winter Schools 2017 et 2018, School for advanced sciences of Luchon, Luchon-Superbagnères, France
- 16^{ème} Rencontre des Chimistes Théoriciens Francophones (RCTF 2018), Toulouse, France
- DeMon Workshop 2019, Fréjus, France
- Ecole d'Été Pluridisciplinaire en Nanosciences et Nanotechnologies 2020 de l'EUR NanoX, Toulouse, France.

RESEAUX COLLABORATIFS

- ANR (Agence nationale de la recherche) projet n°ANR-13-BS08-0005 PARCS
- ERC (European Research Council) grant Nanocosmos (ERC-2013-SyG Grant Agreement n° 610256)
- ANR (Agence nationale de la recherche) projet n°ANR-16-CE29-0025 PACHYNO
- ANR (Agence nationale de la recherche) projet n°ANR-18-CE05-0028 MUSCOFI
- ANR (Agence nationale de la recherche) projet n°ANR-19-CE29-0008-01 ZEOORG

RESPONSABILITES COLLECTIVES

- Webmaster du site web du LCPQ (2015-maintenant)
- Membre du conseil de laboratoire du LCPQ (2016-maintenant)
- Membre du bureau de l'Ecole doctorale Sciences de la Matière (2016-maintenant)
- Membre élu au conseil du département de chimie et membre du bureau (2016-2021)
- Membre nommé au collège scientifique de chimie de l'Université Paul Sabatier (2018-2021)
- Membre élu à la Commission Formation et Vie Universitaire de l'UPS (2020-2024)
- Membre élu au Conseil Académique de l'UPS (2020-2024)
- Membre élu à la Commission Disciplinaire de l'UPS (2020-2024)