



## Nathalie GUIHERY

Professeur de l'université Toulouse 3, Paul Sabatier  
Laboratoire de Chimie et Physique Quantiques UMR5626  
Bât 3R1B4 2<sup>ème</sup> étage porte 211  
Université de Toulouse 3 Paul Sabatier,  
118 route de Narbonne, 31062 Toulouse  
Email : [nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr](mailto:nathalie.guihery@irsamc.ups-tlse.fr)  
Tél : 0561556098  
Fax : 0561556065

### Curriculum Vitae Synthétique:

1991-1992 : DEA de physique fondamentale : Atomes, molécules, photons et leurs interactions.  
1992-1995 : Thèse sous la direction de Jean-Paul Malrieu et Daniel Maynau au laboratoire de Physique Quantique (UMR5626) de l'université Paul Sabatier.  
1992-1995 : Monitrice de l'université Paul Sabatier de Toulouse en Physique.  
1995-1996 : Attachée temporaire d'enseignement et de recherche (ATER) en section 31 de l'université Paul Sabatier.  
1996-2009 : Maître de conférences en section 31 de l'université Paul Sabatier.  
1999-2000 : Stage d'un an au laboratoire de Physique des Interactions Fondamentales de l'Institut Supérieur Technique de Lisbonne, Portugal, collaboration avec Vitor Rocha Viera et Pedro Sacramento.  
2001-2003 : Délégation au CNRS en section 13.  
2005- : Directrice de l'équipe « Système étendu et magnétisme ».  
2005- : Membre du conseil scientifique du laboratoire.  
2006 : Habilitation à diriger des recherches  
2009- : Professeur de l'université de Toulouse 3 Paul Sabatier en section 31.  
2012- : Membre du comité national Co-CNRS en section 13  
2013- : Expert de l'AERES

## Activité scientifique :

### Méthodologie :

**Méthodes de traitement simultané des corrélations non dynamique et dynamique.** Les travaux réalisés concernent i) des méthodes auto-cohérentes et cohérentes en taille d'habillage multi-référence de matrices d'Interaction de Configurations tronquées utilisant le hamiltonien de Heisenberg (simple-référence SC<sup>2</sup> et multi-référence MRSC<sup>2</sup>), ii) des méthodes *ab initio* en orbitales localisées ; l'objectif de nos activités dans ce sujet a été de tester une nouvelle technique de localisation et de sélection des configurations sur des composés corrélés et d'effectuer des analyses systématiques des différentes contributions de la corrélation électronique ; iii) les couplages spin-orbite et spin-spin dans les procédures à deux étapes de type « interaction spin-orbite entre états » (spin-orbit state-interaction SO-SI) ; le travail a consisté à calibrer les méthodes programmées dans MOLCAS et ORCA en testant de façon systématique les effets de la base, du nombre d'états impliqués dans l'interaction, de l'extension de l'espace actif, du traitement perturbatif ou variationnel de la corrélation, etc. afin de reproduire avec précision les paramètres RPE ; iv) l'obtention d'orbitales magnétiques de bonne qualité afin de réduire le coût calculatoire du traitement a posteriori de la corrélation électronique, en particulier dans les systèmes magnétiques organiques.

### Applications:

Les travaux applicatifs concernent la rationalisation de propriétés électroniques remarquables. Ils conjuguent l'utilisation de méthodes *ab initio* sophistiquées, la théorie des hamiltoniens effectifs, des développements analytiques permettant la dérivation de nouveaux hamiltoniens modèles et le traitement des effets collectifs (détaillé dans la partie suivante) dans les matériaux corrélés ou nano-objets. Les objets d'étude sont d'intérêts soit chimique soit physique, de natures très variées, et leur propriétés ont une origine quantique.

#### 1. Problématique.

**Les propriétés des composés et matériaux aux propriétés électroniques remarquables** telles que la commutation moléculaire, le magnétisme, la magnétorésistance colossale ou encore l'anisotropie magnétique se rencontrent généralement dans les systèmes à forte corrélation électronique et concernent aussi bien des composés ou matériaux moléculaires que des matériaux corrélés. La richesse de cette thématique tient en particulier à la complexité et à l'abondance des phénomènes physico-chimiques qu'elle met en jeu mais aussi à la formidable maîtrise des chercheurs impliqués dans la synthèse de composés aux propriétés inédites et contrôlées. Les étapes de conception, réalisation, et caractérisation de ces nouveaux systèmes requérant des compétences multiples justifient la diversité de la communauté scientifique qui s'y consacre et lient indissolublement expérience et théorie, chimie et physique. C'est la nécessité de connexions entre les échelles microscopiques et macroscopiques qui explique ici la complicité entre les différentes communautés. En effet, alors que les propriétés remarquables sont macroscopiques, elles sont intrinsèquement liées au comportement quantique de la matière. Leur rationalisation nécessite l'identification de leur origine microscopique et donc des interactions électroniques responsables de ces propriétés, préoccupation du chimiste théoricien, mais aussi un traitement adéquat des effets collectifs qui est plus traditionnellement un objet d'étude du physicien théoricien.

Dès que la taille du système excède deux ou trois centres métalliques, l'utilisation du hamiltonien électronique exact devient impossible et les physiciens théoriciens comme les expérimentateurs ont recours à des hamiltoniens plus simples appelés hamiltoniens modèles. Ils contiennent l'information microscopique clef et ouvrent la voie à l'exploration des propriétés collectives. C'est donc autour de ces hamiltoniens que s'articule la transition entre le microscopique et le macroscopique. Si la forme des hamiltoniens modèles peut parfois être anticipée de façon phénoménologique, leur déduction rationnelle à partir du hamiltonien électronique exact requiert les méthodes et outils de la chimie théorique. La méthodologie joue un rôle important dans ce domaine. Les interactions recherchées varient entre quelques dixièmes et quelques centaines de  $\text{cm}^{-1}$  et la précision est une des préoccupations majeures du chimiste théoricien. D'un point de vue plus qualitatif, certains des travaux que nous avons réalisés ont montré que plusieurs hamiltoniens usuels étaient erronés et des modèles alternatifs adaptés ont été dérivés (Heisenberg  $S=1$ , double échange, hamiltonien de spin anisotropes spin-géant et multi-spin). Enfin, une partie importante est consacrée à la rationalisation de la nature et de l'amplitude des propriétés observées, en particulier pour la propriété singulière d'anisotropie magnétique.

## 2. Systemes étudiés :

Une partie conséquente de ces travaux a été réalisée en collaboration avec des expérimentateurs. Plusieurs articles concernent l'extraction rigoureuse et la dérivation analytique de hamiltoniens modèles pour des matériaux ou composés dont les propriétés sont très variées.

Les systèmes concernés sont:

- i) des matériaux fortement corrélés présentant du magnétisme seul (nickelates, cuprates, etc.)
- ii) des matériaux présentant du magnétisme et des propriétés de transport (manganites)
- iii) des composés organiques magnétiques dérivés du graphène (spintronique).
- iv) des composés à transition de spin (effet LIESST)
- v) des polyoxométallates
- vi) des molécules anisotropes (molécules aimants, paramètres RPE)

## Traitement des effets collectifs :

**Conception et programmation de logiciels de résolutions approchées de modèles sur des systèmes de spins infinis.** Certaines méthodes constituent des transcriptions des approches Coupled Cluster aux systèmes périodiques. Dans un registre très différent, celle du groupe de renormalisation dans l'espace réel avec interactions effectives est probablement la plus élégante et la plus efficace en ce qui concerne la détermination des transitions de phase. Elle préserve l'esthétique intellectuelle de la méthode originelle de Wilson tout en améliorant spectaculairement ses performances. Parmi les modèles programmés, citons les modèles de Heisenberg  $S=1/2$  isotrope et anisotrope, Heisenberg  $S=1$  incluant des termes biquadratiques et un opérateur à trois corps, Hubbard, un hamiltonien t-J sophistiqué incluant les répulsions entre trous, la dépendance des paramètres au voisinage électrostatique (termes à six corps) et les propagations de singulet (termes à trois corps aussi appelé « exchange transfer ») et le hamiltonien de double échange.

## **Co-organisations (ateliers, colloques, congrès, etc.) :**

- Ecole d'été « Etats excités », 1998 (accueil des participants, organisation de la sortie « Visite culturelle »)
- Congrès CHITEL Septembre 2001, Toulouse (sélection de conférenciers, accueil des participants et inscriptions, repas du congrès, excursion culturelle du congrès)
- Rencontre scientifique en l'honneur de Jean-Paul Malrieu, Mai 2004 à Lagrasse, France (intégralité des domaines d'organisation : sélection et logement des conférenciers, élaboration du programme, organisation des visites culturelles et du repas de banquet, location de l'abbaye de Lagrasse, etc.).
- Workshop JIJOLS Septembre 2006, Jujols, France (intégralité des domaines d'organisation)
- Journées de l'IRSAMC 2008, Janvier 23-25, Perpignan (Transport des participants, élaboration du programme, accueil des participants, logistique).
- Congrès MOLMAT 2008, Toulouse (logements des participants, sélection des conférenciers théoriciens, logistique)
- Rencontre ANR TEMAMA 2010 (Elaboration du programme, organisation des repas et logements)
- Workshop CECAM 2011 (CF-CAM grand sud ouest) (sélection des conférenciers, suivi des inscriptions, élaboration du programme, accueil des participants). Ce workshop n'apparaît pas dans la liste officielle des « workshop CECAM » car la décision définitive de faire de Toulouse un nœud du CECAM a été postérieure à la sélection des ateliers.

## **Direction de thèses et autres travaux :**

- 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
- Direction d'étudiants en Master (20 étudiants)

## **Appartenance à des structures de collaboration nationale et internationale :**

- 1997-2000 réseau européen TMR QUCEX : QUAntum Chemistry for Excited States
- 2001-2004 PICS 1458 Franco-Espagnol : *Etudes théoriques de matériaux à propriétés remarquables*
- 2002-2006 COST D26/003/02: *A Local approach for quasi-degenerate systems.*
- 2002-2006 COST D26/0008/02: *Theoretical studies of magnetic systems.*
- 2008- PICS 4263 Franco-Italien : *Développements et applications de méthodes ab initio*
- 1999-2006 puis 2007-2011 Plan Pluri Formation (PPF) *Fermions Fortement Corrélés.* Responsable : D. Poilblanc, laboratoire de Physique Théorique (Toulouse).
- 2002-2006 GDR NEEM Nouveaux états électroniques des matériaux. Responsable : C. Simon Laboratoire CRISMAT (Caen).
- 2006-2010 Réseau Européen d'excellence MAGMANET.
- 2007- 2011 puis 2012- GDR MCM Magnétisme et commutation moléculaire. Responsable : A. Bousseksou, laboratoire de Chimie de Coordination, (Toulouse), puis J.F. Létard, Institut de Chimie de la Matière Condensée de Bordeaux. Membre du bureau.

- 2007-2010, 2010-2013 : GDR C'Nano Grand Sud-Ouest (X. Bouju CEMES, Toulouse)
- 2008-2012, 2012- GDR MICO *Matériaux et interactions en compétition*. Responsable M. B. Lepetit (Institut Néel, Grenoble).
- 2010- : COST CODECS : CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy (V. Barone, Université de Pise, Italie)
- 2011- European Institute of Molecular Magnetism (EIMM). Chairman : D. Gatteschi
- LABEX NEXT Gouvernance : Xavier Marie
- IDEX des universités et grandes écoles de Toulouse.

### **Contrats acceptés ou en cours d'évaluation**

- Porteur de l'ANR TEMAMA ANR-09-BLAN-0195-01 (583k€) et coordinatrice du partenaire 1 (4 ans +1 an de prolongation. 4 partenaires (LNCMI Grenobles, ICCMO Orsay, LCPQ Toulouse, LCQ Strasbourg) initialement, 3 partenaires à présent car H. Bolvin a rejoint l'équipe SEM.
- Porteur d'un projet BQR A01 2011. Collaboration avec JP Sutter du LCC, Toulouse.
- Projet PEPS. Responsable du partenaire 2. Collaboration avec R. Bastardis (porteur) à Perpignan.
- Porteur du projet ANR –ELECTROSPIN. Le pré-projet a été accepté.

### **Collaborations avec des universités étrangères (et/ou invitations ponctuelles)**

- Avec la Syrie : participation à la rencontre Franco-Syrienne organisée par Jean Claude Barthelat et Khansa Hussein de l'université de Homs.
- Avec la Tunisie : durant la thèse de Tarha Ayed, en co-tutelle franco-tunisienne, j'ai collaboré avec Bahoueddine Tangour. Cours à l'école de Physique et Chimie théorique de Carthage (Mars 2006)
- Avec l'Italie : collaboration ponctuelle avec Celestino Angeli de l'université de Ferrara.
- Avec l'Espagne : collaboration au long court avec Rosa Caballol et Coen de Graaf de l'université Rovira et Virgili de Tarragone et avec Carmen Jimenez Calzado de l'université de Seville.
- Avec la Chine : cours de magnétisme en 2008 à Nankin (professeurs Shuhua Li et Jing Ma). Contribution à la rencontre franco-chinoise : « Chinese French Workshop in Theoretical Chemistry CFWTC 2013 » à Nankin.
- Avec les Pays Bas : collaboration avec le professeur Ria Broer de Groningen (échange d'étudiants Erasmus Mundus, conférence en son honneur (2012), séminaire dans le cadre du Zernique Colloquium dans son institut).
- Avec l'Allemagne : collaboration avec le professeur Frank Neese (directeur du Max Plank institute de Mulheim (échange d'étudiants, séminaire (2009) dans son laboratoire à Bonn).

### **Fonction d'expertise :**

- Membre du comité national de la recherche Co-CNRS section 13 dans le mandat actuel (2012-2016).
- Expert de l'AERES.
- Reviewer pour de nombreuses revues à comité de lecture dont JCTC, PCCP, Inorg. Chem., J. Chem. Phys., J. Phys. Chem., Chem. Eur. J., etc.,

### **Responsabilités éditoriales :**

- Co-éditrice d'un numéro spécial de *Theoretical Chemistry Account* en l'honneur de Jean-Paul Malrieu.
- Co-éditrice du livre blanc du GDR MCM (à paraître)

### **Participations à des jurys de thèse et de HDR :**

- Thèse 2005 : Mohammed Alhadj, directeur Jean Paul Malrieu, LCPQ, Toulouse
- Thèse 2006 : Tarha Ayed, directeurs Bahoueddine Tangour et Jean Claude Barthelat LCPQ, Toulouse
- Thèse 2007 : Roland Bastardis, directrice Nathalie Guihéry LCPQ, Toulouse
- HDR 2009 : Ilaria Ciofini, Ecole nationale supérieure de Paris (rapporteur)
- Thèse 2010 : Carlos Bartual Murgu, directeur Azzedine Bousseksou, LCC Toulouse
- Thèse 2010 : Mikael Képénékian, directeur Vincent Robert ENS Lyon (rapporteur)
- Thèse 2010 : Esther Bordas, directeur Rosa Caballol Université de Tarragone, Espagne
- Thèse 2011 : Zarha Tabookht, directeurs Xavier López et Coen de Graaf, Université de Tarragone, Espagne (président)
- Thèse 2011 : Maliheh Sadat Mousavi Sangdehi directeur Jean Pascal Sutter, LCC Toulouse
- Thèse 2011 : Rémi Maurice directeurs Nathalie Guihéry et Coen de Graaf, LCPQ Toulouse
- Thèse 2011 : Corentin Boilleau directeurs Nathalie Guihéry et Nicolas Suaud, LCPQ Toulouse
- Thèse 2012 : Esther Coulaud directeur Nicolas Ferré Université d'Aix Marseille
- Thèse 2013 : Renaud Ruamps directrice Nathalie Guihéry, LCPQ Toulouse
- Thèse 2013 : Arunangshu Debnath directeur Chris Meyer, LCAR, Toulouse (président)

### **Distinctions :**

- De 2008 à 2012 prime d'encadrement doctoral et de recherche (PEDR)
- Depuis 2012, prime d'excellence (PES)

## 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 « Corrélation 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.



## 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  $[GeV_{14}O_{40}]^{8-}$ .*
- **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  $NiGa_2S_4$ .*
- **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 NiGa<sub>2</sub>S<sub>4</sub>.*

### **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.

### **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)

## Liste des productions :

### 1. Liste des publications :

Publications parues dans des journaux de rang A :

- [1] N. Guihéry, G. Durand, M.B. Lepetit, J. P. Malrieu, *Bistability in molecular donor acceptor complexes*, CHEM. PHYS. **183** (1994) 61
- [2] N. Guihéry, G. Durand, M.B. Lepetit, *Bistable mixed-valence molecular architectures for bit storage*, CHEM. PHYS. **183** (1994) 45
- [3] N. Guihéry, D. Maynau, et Jean-Paul Malrieu *From quinoidal to diradical structure in substituted n-para- xylylene (n=1,2,3) molecules : A Heisenberg Hamiltonian study*, CHEM. PHYS. LET. **248** (1996) 199
- [4] N. Guihéry, N. Benamor, D. Maynau, J. P. Malrieu, *Approximate Size-consistent treatments of Heisenberg Hamiltonians for large systems*, J. CHEM. PHYS. **104** (1996) 3701
- [5] S. Capponi, N. Guihéry, J. P. Malrieu, B. Miguel, D. Poilblanc, *Bond alternation of polyacetylene as a spin-Peierls distortion*, CHEM. PHYS. LET. **255** (1996) 238
- [6] N. Guihéry, J. P. Malrieu, D. Maynau, P. Wind, *A statistical multireference state-specific dressing of configuration interaction matrices : Application to Heisenberg Hamiltonian*, MOL. PHYS. **94** (1996) 209
- [7] N. Guihéry, J. P. Malrieu, D. Maynau, K. Handrick, *Unexpeted CASSCF bistability phenomenon*, INT. J. OF QUANT. CHEM. **61** (1997) 45
- [8] B. Miguel, P. Wind, N. Guihéry, J.P. Malrieu, *Approaching periodic systems by a selfconsistent embedding of a finite cluster*, CHEM. PHYS. LET. **283** (1998) 77
- [9] N. Guihéry, D. Maynau, and Jean-Paul Malrieu *Search for Singlet-Triplet bistabilities in conjugated hydrocarbons*, NEW J. OF CHEM. **22** (1998) 281
- [10] B. Miguel, N. Guihéry, J. P. Malrieu, P. Wind, *Study of infinite polyacetylene from a Heisenberg Hamiltonian : Dimerization and lowest excitation energies*, CHEM. PHYS. LET. **294** (1998) 49
- [11] P. Wind, N. Guihéry, J. P. Malrieu, *Approximation of an infinite periodic system by a self consistent embedding of a finite cluster : The Dressed Cluster method*, PHYS. REV. B **59** (1999) 2556
- [12] J.P. Malrieu, N. Guihéry, *Real Space Renormalization Group with effective interactions*, PHYS. REV. B **63** (2001) 85110-1-10
- [13] V.R. Viera, N. Guihéry, J.P. Rodriguez, P.D. Sacramento, *Decoupling of the s=1/2 antiferromagnetic zig-zag ladder with anisotropy*, PHYS. REV. B **63** (2001) 224417-1-11
- [14] N. Guihéry, J. P. Malrieu, S. Evangelisti, D. Maynau, *Correlated description of multiple bonds using localized active orbitals*, CHEM. PHYS. LET. **349** (2001) 555-561
- [15] D. Maynau, S. Evangelisti, N. Guihéry, C. Calzado, J. P. Malrieu, *Direct generation of local orbitals in multireference treatment and subsequent uses for the calculation of the correlation energy*, J. CHEM. PHYS. **116** (2002) 10060
- [16] I. de P.R. Moreira, N. Suaud, N. Guihéry, J. P. Malrieu, R. Caballol, J. M. Bofill, F. Illas, *Derivation of spin Hamiltonians from the exact Hamiltonian : Application to systems with two unpaired electrons per magnetic site*, PHYS. REV. B **66** (2002) 134430-1-14
- [17] C. Angeli, C. Calzado, R. Cimraglia, S. Evangelisti, N. Guihéry, T. Leininger, J. P. Malrieu, D. Maynau, J.V. Pitarch Ruiz, M. Sparta, *The use of local orbitals in multireference calculations*, MOL. PHYS. **101** (2003) 1389

- [18] N. Guihéry, J. P. Malrieu, *The double exchange mechanism revisited : An ab initio study of the  $[Ni_2(napy)_4Br_2]^+$  complex*, J. CHEM. PHYS. **119** (2003) 8956
- [19] N. Guihéry, J. P. Malrieu, S. Evangelisti, *Orbital optimization : Density matrix-based procedure versus energy minimization*, J. CHEM. PHYS. **119** (2003) 11088
- [20] M. Al Hajj, N. Guihéry, J. P. Malrieu, P. Wind, *Theoretical study of the phase transition in the anisotropic 2D square spin lattice*, PHYS. REV. B, **70** (2004) 094415-1-6
- [21] M. Al Hajj, N. Guihéry, J. P. Malrieu, B. Bocquillon, *Real Space Renormalization Group with effective interactions : Study of phase transitions in 2D lattices*, EUR. PHYS. J. B, **41** (2004) 11
- [22] D. Taratiel, N. Guihéry, *A refined model of the double exchange phenomenon : Test on the stretched  $N+ 2$  molecule*, J. CHEM. PHYS. **121** (2004) 7127
- [23] S. Evangelisti, N. Guihéry, T. Leininger, J.-P. Malrieu, D. Maynau, J.-V. Pitarch-Ruiz, N. Suaud, C. Angeli, R. Cimraglia, et C. J. Calzado, *Local Orbitals for Quasi-Degenerate Systems*, J. MOL. STRUCT. (Theo. Chem.) **709** (2004) 1
- [24] Y. Carissan, J. L. Heully, N. Guihéry, F. Alary, *A study of the correlation effects upon the modelization of the double exchange phenomenon*, J. CHEM. PHYS. **121** (2004) 9453
- [25] M. Al Hajj, J. P. Malrieu, N. Guihéry, *A renormalized excitonic method*, PHYS. REV. B **72** (2005) 224412-1-8
- [26] S. Baig, B. Richard, P. Serp, C. Mijoule, K. Hussein, N. Guihéry, J.C. Barthelat and P. Kalck, *Synthesis of a series of di-palladium(I) complexes containing the  $Pd_2(\mu CO)_2$  core, and DFT analysis of the Pd-CO back-donation in terminal and bridging CO*, INORG. CHEM. **38** **45** (2006) 1935
- [27] S. Messaoudi, V. Robert, N. Guihéry, *Correlated ab initio study of the excited state of the iron-coordinated-mode noninnocent glyoxal-bis(mercaptoanil) ligand.*, INORG. CHEM. **45** (2006) 3212
- [28] R. Bastardis, N. Guihéry, C. de Graaf, *Ab initio study of the Zener polaron spectrum of half-doped manganites : Comparison of several model Hamiltonians*, PHYS. REV. B **74** (2006) 014432-1-10
- [29] B. Lévy, P. Millié, F. Spiegelman, J. S. Marin et N. Guihéry, *About the scientific contribution of Jean Paul Malrieu* article éditorial du numéro spécial de THEOR. CHEM. ACC. en l'honneur de Jean-Paul Malrieu, **116** (4-5) (2006) 383
- [30] N. Guihéry, *The double exchange phenomenon revisited : The  $[Re_2OCl_{10}]^{3-}$  compound*, THEOR. CHEM. ACC. **116** (2006) 576
- [31] Tahra Ayed, Nathalie Guihéry, B. Tangour and Jean Claude Barthelat, *Theoretical study of the metal-metal interaction in dipalladium(I) complexes*, THEOR. CHEM. ACC. **116** (2006) 497
- [32] R. Bastardis, N. Guihéry, N. Suaud, C. de Graaf, *Competition between double exchange and purely magnetic Heisenberg models in mixed valence systems : Application to half-doped manganites*, J. CHEM. PHYS., **125** 194708-1-10 (2006)
- [33] J.P. Malrieu, N. Guihéry, C.J. Calzado, C. Angeli *Bond electron pair: Its relevance and analysis from the quantum chemistry point of view*, J. COMP. CHEM. **28** (2007) 35
- [34] R. Bastardis, N. Guihéry, N. Suaud, *Relation between double exchange and Heisenberg model spectra : Application to the half-doped manganites*, PHYS. REV. B, **75**, 132403 (2007)
- [35] R. Bastardis, N. Guihéry, C. de Graaf, *Microscopic origin of isotropic non-Heisenberg behavior in  $S=1$  magnetic systems*, PHYS. REV. B, **76** 132412 (2007)
- [36] R. Bastardis, N. Guihéry, C. de Graaf, *Ab initio study of the CE magnetic phase in half doped manganites : Purely magnetic versus double exchange description*, PHYS. REV. B, **39** **77**, 054426 (2008)
- [37] R. Bastardis, C. de Graaf, N. Guihéry, *Isotropic non-Heisenberg terms in the magnetic coupling of transition metal complexes*, J. CHEM. PHYS., **129** 154102 (2008)

- [38] P. Labèguerie, C. Boilleau, R. Bastardis, N. Suaud, J.P. Malrieu, N. Guihéry *Is it possible to determine rigorous magnetic Hamiltonians in spin  $S=1$  systems from density functional theory calculations* J. CHEM. PHYS., 129 154110 (2008)
- [39] N. Guihéry, V. Robert, F. Neese *Ab initio study of intriguing coordination complexes : A metal-field theory picture*, J. PHYS. CHEM. A 112 12975 (2008)
- [40] N. Suaud, M-L Bonnet, C. Boilleau, P. Labèguerie and N. Guihéry *Light-induced excited spin state trapping : ab initio study of the physics at the molecular level* , J. AM. CHEM. SOC. 132 715 (2009)
- [41] Suaud N. ; Masaro Y. ; Coronado E. ; et al. *Origin of the Paramagnetic Properties of the Mixed-Valence Polyoxometalate [GeV(14)O(40)](8-) Reduced by Two Electrons : Wave Function Theory and Model Hamiltonian Calculations* EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY 34, 5109-5114 (2009)
- [42] Maurice Remi ; Bastardis Roland ; de Graaf Coen ; et al. *Universal Theoretical Approach to Extract Anisotropic Spin Hamiltonians* JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 5 11, 2977 2984 2009
- [43] Maurice Remi ; Guihery Nathalie ; Bastardis Roland ; et al. *Rigorous Extraction of the Anisotropic Multispin Hamiltonian in Bimetallic Complexes from the Exact Electronic Hamiltonian* JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 6 1, 55-65 (2010)
- [44] Boilleau Corentin ; Suaud Nicolas ; Bastardis Roland ; et al. *Possible use of DFT approaches for the determination of double exchange interactions* THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 126 3-4 231-241 (2010)
- [45] Maurice R. ; Pradipto A. M. ; Guihéry N. ; et al. *Antisymmetric Magnetic Interactions in Oxo-Bridged Copper(II) Bimetallic Systems* JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 6 10, 3092 3101 (2010)
- [46] Maurice Remi ; de Graaf Coen ; Guihéry Nathalie *Magnetostructural relations from a combined ab initio and ligand Field analysis for the nonintuitive zero-Field splitting in Mn(III) complexes* JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 1338 Art. Num. : 084307 (2010)
- [47] Maurice Remi ; de Graaf Coen ; Guihéry Nathalie *Magnetic anisotropy in binuclear complexes in the weak-exchange limit : From the multispin to the giant-spin Hamiltonian* PHYSICAL REVIEW B 81 21 Art. Num. : 214427 (2010)
- [48] Trinquier Georges ; Suaud Nicolas ; Guihéry Nathalie ; et al. *Designing Magnetic Organic Lattices from High-Spin Polycyclic Units* CHEMPHYSICHEM 12 16, 3020-3036 (2011)
- [49] Maurice Remi ; Sivalingam Kanthen ; Ganyushin Dmitry ; et al. *Theoretical Determination of the Zero-Field Splitting in Copper Acetate Monohydrate* INORGANIC CHEMISTRY 50 13,6229-6236 (2011)
- [50] Terencio T. ; Bastardis R. ; Suaud N. ; et al. *Physical analysis of the through-ligand long-distance magnetic coupling : spin-polarization versus Anderson mechanism* PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 13 26, 12314-12320 (2011)
- [51] Batchelor Luke J. et al. *Pentanuclear Cyanide-Bridged Complexes Based on Highly Anisotropic Co(II) Seven-Coordinate Building Blocks : Synthesis, Structure, and Magnetic Behavior* INORGANIC CHEMISTRY 50 23, 12045-12052 (2011)
- [52] Pradipto Abdul-Muizz ; Maurice Remi ; Guihéry Nathalie ; et al. *First-principles study of magnetic interactions in cupric oxide* PHYSICAL REVIEW B 85 art. num.: 014409 (2012)
- [53] Tabookht, Zahra; Lopez, Xavier; de Graaf, Coen; Guihery; Suaud, N; Benamor, N *Rationalization of the behavior of  $M_2(\text{CH}_3\text{CS}_2)_4\text{I}$  ( $M = \text{Ni}, \text{Pt}$ ) chains at room temperature from periodic density functional theory and ab initio cluster calculations* JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 33 1748-1761 (2012)

- [54] Coulaud, Esther; Guihery, Nathalie; Malrieu, Jean-Paul; Hagebaum-Reignier, D; Siri, D; Ferre, N; *Analysis of the physical contributions to magnetic couplings in broken symmetry density functional theory approach* JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 137 art. num. 114106 (2012)
- [55] Suaud, Nicolas; Ruamps, Renaud; Guihery, Nathalie; Malrieu, Jean Paul; *A Strategy to Determine Appropriate Active Orbitals and Accurate Magnetic Couplings in Organic Magnetic Systems*; JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 8 4127-4137 (2012)
- [56] Boilleau, Corentin; Suaud, Nicolas; Guihery, Nathalie; *Ab initio study of the influence of structural parameters on the potential energy surfaces of spin-crossover Fe(II) model compounds*; JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 137 art. num. 224304 (2012)
- [57] Ruamps, Renaud; Batchelor, Luke J.; Maurice, Remi; Gogoi, N ; Jimenez-Lozano, P; Guihery, N; de Graaf, C; Barra, AL; Sutter, JP; Mallah, T; *Origin of the Magnetic Anisotropy in Heptacoordinate Ni-II and Co-II Complexes* CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 19 950-956 (2013)
- [58] Ruamps, Renaud; Maurice, Remi; Batchelor, Luke; ; Boggio-Pasqua, M; Guillot, R; Barra, A.L.; Liu, JJ; Bendeif, E; Pillet, S; Hill, S; Mallah, T; Guihery, N; *Giant Ising-Type Magnetic Anisotropy in Trigonal Bipyramidal Ni(II) Complexes: Experiment and Theory*; JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY; 135 3017-3026 (2013)
- [59] Coulaud, Esther; Malrieu, Jean-Paul; Guihery, Nathalie; et al., *Additive Decomposition of the Physical Components of the Magnetic Coupling from Broken Symmetry Density Functional Theory Calculations* JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION; 9 3429-3436 (2013)
- [60] Maurice, Remi; de Graaf, Coen; Guihery, Nathalie, *Theoretical determination of spin Hamiltonians with isotropic and anisotropic magnetic interactions in transition metal and lanthanide complexes*, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 15 18784-18804 (2013)
- [61] Jean-Paul Malrieu, Rosa Caballol, Carmen J. Calzado, Coen de Graaf, Nathalie Guihéry, *Magnetic interactions in molecules and highly correlated materials: Physical content, analytical derivation and rigorous extraction of magnetic Hamiltonians from wave-function theory and density functional theory*". CHEMICAL REVIEW DOI 10.1021/cr300500z
- [62] *Singly occupied MOs in Mono- and diradical conjugated hydrocarbons: comparison between variational single-reference, fully correlated and Huckel descriptions*, N. Suaud, R. Ruamps, J. P. Malrieu and N. Guihéry, in press JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, DOI 10.1021/jp4120892
- [63] *Interplay between local anisotropies in bi-nuclear complexes*, R. Ruamps, R. Maurice, C. de Graaf and N. Guihéry, accepted INORGANIC CHEMISTRY

## 2. Chapitres de livres :

- [1] M. Al Hajj, N. Guihéry, J.P. Malrieu, *Introduction of effective interactions in Real Space Renormalization Techniques* World Scientific, Review Book, *Strongly correlated systems, coherence and entanglement* (2007)
- [2] Roland Bastardis, Nathalie Guihéry *Competition between several model Hamiltonians in half-doped manganites* World Scientific, Review Book, *Strongly correlated systems, coherence and entanglement* (2007)

3. Conférences invitées, des conférences obtenues sur propositions, Cours dans des écoles thématiques ou masters internationaux et séminaires invités

3.1 Liste des conférences invitées : les plénières (CP) apparaissent en premier

- [1] CP1 : *Some missions of quantum theoreticians in the domain of magnetism* MOLECULAR MATERIALS (MOLMAT 2006), Lyon, June 7th-10th 2006.
- [2] CP2: *Determination of magnetic interactions in extended magnetic systems*, THETIS, Pisa, Italy 18th-20th February 2009
- [3] CP3: *Accurate calculation of the Zero Field Splitting parameters in transition metal complexes* Congrès de Chimie Théorique d'expression latine CHITEL 2010 Anglet, France, Septembre 2010
- [4] CP4 : *Magnetic anisotropy in mono and bi-nuclear transition metal compounds: Combining wave function based calculations and the effective Hamiltonian theory*, 48th Symposium on Theoretical Chemistry STC, September 23th-27th 2012 Karlsruhe (Germany)
- [5] *From quinoidal to diradical structure in (para - xylylenes) (n=1,2,3) : bistability or progressive mixing?* Quantum Theory Conference, September 17th-20th 1994, University of Sheffield, Angleterre
- [6] *Localized description in multireference contexts*, 6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC, 4-9 Aout 2002 Lugano, Suisse
- [7] *Possible use of quantum chemistry for the study of physical and chemical properties of magnetic systems*, The 1st French-Syrian conference on Chemistry, Novembre 2003, Homs, Syrie
- [8] *Etude et détermination d'interactions électroniques fondamentales dans les composés magnétiques à partir de calculs ab initio*, Les journées "Magnétisme" de l'UMR de chimie, Novembre 2004, Ecole normale Supérieure de Lyon.
- [9] *Ab initio study of the physics of Zener polarons in half-doped manganites* CECAM Workshop, Lyon, Juillet 18-21, 2006.
- [10] *Magnetic interactions in conjugated diradicals* International Symposium on Novel Aromatic Compound (ISNA-13) Satellite meeting Diradicals and Multiradicals: Theory and Experiment, Namur, Belgique, Juillet 2009
- [11] *Extraction of anisotropic spin Hamiltonian from the effective Hamiltonian theory and correlated ab initio calculations* Satellite de l'ECMM (European Congress of Molecular Magnetism), Wroclaw, Pologne, Octobre 2009
- [12] *Extraction of model Hamiltonians from the effective Hamiltonian theory: applications to molecular magnetism* atelier "Magnétisme" du GDR DFT, ENS Lyon, Novembre 2010.
- [13] *Combining high spin organic units to generate ferromagnetic, antiferromagnetic and ferrimagnetic systems* (WATOC) satellite meeting: Theoretical modeling of materials, Barcelone, Espagne, Juillet 2011.
- [14] *Theoretical description of anisotropy in mono- and bi-nuclear transition metal complexes* World Association of Theoretical and computational chemists (WATOC), Santiago de Compostela, Espagne, Juillet 2011.
- [15] *How to build appropriate magnetic orbitals for accurate evaluation of magnetic couplings?* Conference in honor of Ria Broer, Groningen (The Netherlands) Auguts 30th - September 1rst 2012.
- [16] *How many spins can be aligned by a single hole ?* Theoretical Chemistry in Spain told by women, January 30th-31st 2013 Tarragona, Spain
- [17] *Synergy and Destructive Interferences Between Local Anisotropies in Binuclear Complexes: New Insights from Theory* 2nd International Conference in Bimetallic Complexes 2013, 23th-25th September 2013, Karlsruhe, Germany

### 3.2 Liste des contributions orales :

- [18] *A statistical multireference state-specific dressing of configuration interaction matrices : application to Heisenberg Hamiltonian*, Mars 1998, Réunion du réseau TMR QUCEX, Knokke de Zoute, Belgique
- [19] *Possible use of localized orbitals in the calculations of magnetic couplings*, Franco-Spanish PICS meeting, Juin 2002, Tarragona, Espagne
- [20] *The use of local orbitals in multireference calculations* COST D26 meeting, November 2002, Toulouse
- [21] *Revised double exchange model : application to the  $[Ni_2(napy)_4Br_2]^+$  compound*, Franco Spanish PICS meeting, Mars 2003, Toulouse
- [22] *Magnétisme dans les complexes à double échange*, Congrès des Chimistes théoriciens d'Expression Latine (CHITEL), Septembre 2004, Porto, Portugal
- [23] *Zener polaron localization in half-doped manganites*, European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS II, Jujols, Juin 23-26, 2006
- [24] *Competition between double exchange and purely magnetic Heisenberg models in half-doped manganites*, European Conference on Molecular Magnetism (ECMM), Octobre 10-15, 2006, Tomar, Portugal
- [25] *Role of the non-Hund states in magnetic systems having two open shells per centre*, Rencontre du PICS Franco-Espagnol, Novembre, 2007, Tarragona, Spain
- [26] *Rôles possible du chimiste quanticien dans les domaines du magnétisme et de la commutation moléculaire*, Rencontre du GDR Magnétisme moléculaire et commutation, Décembre, 2007, Dourdan
- [27] *Rigorous extraction of the Heisenberg Hamiltonian for spin  $S=1$  systems: the role of the three-body operator*; European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS III Perpignan, septembre 2008.
- [28] *Possible rationalization of the anisotropic parameters in mononuclear and binuclear transition metal complexes*, European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS IV, Groningen, Pays Bas, mai 2009.
- [29] *Theoretical study of magnetic organic system*, Rencontre du PICS franco-Italien, Toulouse, Février 2010.
- [30] *Magnétisme moléculaire dans les composés organiques* Rencontre du GDR MCM, Montpellier, Juillet 2010
- [31] *Design of high spin organic magnetic units from simple rules*, European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS V, Horta de Sant Joan, Espagne, Novembre 2010.
- [32] *On the possible use of the multi-spin and giant spin Hamiltonians for the description of the anisotropy in binuclear complexes* COST CODECS (CONvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy) Meeting, Avril 2011, Pise, Italie
- [33] *Zero-Field Splitting in Cupper-acetate : on the importance of the correlation effects*. Rencontre du PICS Franco-italien, Ferrare, Italie Juin 2011
- [34] *Correlation between  $T(LIESST)$  and structural features in spin crossover complexes*, European Workshop on Molecular Magnetism, JUJOLS VI, Seville, Espagne, Février 2012
- [35] *Giant Ising-type magnetic anisotropy in trigonal Ni(II) complexes : competition between first order spin orbit coupling and Jahn Teller effect*. Conference TACC : Theory and Applications in Computational Chemistry: 2-6th september 2012 Pavie (Italie)
- [36] *Interplay between local magnetic anisotropies in polynuclear transition metal complexes*, European Workshop on Molecular Magnetism , JUJOLS VII, 13th -17th January 2014, Mulheim, Allemagne



### 3.3 Liste des séminaires invités (11)

- [1] *Bistabilité dans les composés donneur-accepteur : utilisation possible pour le stockage d'information*, Mars 1996, Laboratoire du CEA, Paris, France
- [2] *Self-Consistent Size-Consistent dressing of Multireference Truncated Configuration Interactions*, Novembre 1998, Torun, Pologne
- [3] *Phase transition of the anisotropic Heisenberg Hamiltonian in spin lattices*, Avril 1999, centro de Fisica das Interaccoes Fundamentais, Instituto Superior Tecnico, Lisbonne, Portugal
- [4] *Real Space Renormalization Group with effective interactions : applications to 1D and 2D spin lattices*, Mai 2000, Dipartimento di Chimica, Universita degli Studi di Ferrara, Ferrare, Italie
- [5] *Etude ab initio de composés à propriétés électroniques remarquables*, Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'ORSAY (ICMMO) Mars (2005)
- [6] *Microscopic origin of isotropic non-Heisenberg behaviour*, Séminaire invité, Bonn, Juin, 2007
- [7] *Traitement théorique de l'anisotropie magnétique dans les molécules aimants*. Séminaire IRSAMC, Toulouse Mai 2009
- [8] *Traitement théorique de l'anisotropie magnétique dans les molécules aimants*, Strasbourg, Avril 2010
- [9] *Traitement théorique de l'anisotropie magnétique sans les complexes mono- et bi-métalliques*, Février 2011, Laboratory Structure et Ractivité des systèmes moléculaires complexes, Nancy
- [10] *Calculs corrélés et relativistes pour la détermination du ZFS (Zero Field Splitting) dans les complexes de métaux de transition*, laboratoire Chimie Provence, Aix-Marseille Université, Décembre 2011.
- [11] *Desctructive interferences and synergy between local anisotropies in bi-nuclear complexes*, Zernike Colloquium, Zernike institute, Gröningen, The Netherlands, december 2013.

### 3.4 Liste des cours invités:

- [1] *La corrélation électronique*, liere Ecole de Carthage de Chimie et Physique théoriques, 22-28 mars 2006
- [2] *Magnetism from a quantum chemist point of view*, Cours : Institute of Theoretical and Computational Chemistry, Nanjing University, 3-6 Juillet 2007
- [3] *Real Space Renormalization Group theory and effective interactions*, Cours: Institute of Theoretical and Computational Chemistry, Nanjing University, 3-6 Juillet 2007
- [4] "Magnétisme" Cours à l'école du Réseau Français des chimistes théoricien, Dourdan, France Novembre 2011.
- [5] Multireference Configuration Interaction method I : the treatment of non-dynamic correlation, Intensive course of the Erasmus Mundus Mater II on Chemistry and Computational Modelling September 2012, Perugia (Italy)
- [6] Multireference Configuration Interaction method II : the treatment of dynamic correlation, Intensive course of the Erasmus Mundus Mater II on Chemistry and Computational Modelling September 2012, Perugia (Italy)
- [7] Multireference Configuration Interaction method I : treatment of non-dynamic correlation, Intensive course of the Erasmus Mundus Mater II on Chemistry and Computational Modelling September 2013, Madrid (Spain)
- [8] Multireference Configuration Interaction method II : treatment of dynamic correlation, Intensive course of the Erasmus Mundus Mater II on Chemistry and Computational Modelling September 2013, Madrid (Spain)