

## Céline LEONARD

Nom de naissance : Destandau  
Nationalité : française  
Date de naissance : 07/12/1973  
Lieu de naissance : Annecy (74)  
Orcid : 0000-0003-0303-3505



### Carrière :

**Janv. 2020 - : Directrice du laboratoire du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS (Tutelles : Univ Gustave Eiffel, Univ Paris-Est Créteil, CNRS).**

Sept. 2010 - : Professeure des Universités rattachée à l'équipe de Chimie Théorique du laboratoire MSME, Université Paris-Est Marne-la-Vallée depuis septembre 2010

- Promotion PR1 en septembre 2016
- Obtention de la prime d'encadrement doctoral en octobre 2015
- Obtention d'un accueil en délégation CNRS au MSME de septembre 2013 à février 2014
- Obtention de la prime d'excellence scientifique en octobre 2011

Habilitation à diriger des recherches intitulée "Le rôle des couplages entre moments angulaires dans la spectroscopie rovibrationnelle des molécules linéaires de 2 à 4 atomes", Université de Marne-la-Vallée, soutenue le 14 décembre 2007

Sept. 2001 - Août 2010 : Maître de Conférences rattachée au laboratoire de Chimie Théorique (LCT) EA2180 de l'Université de Marne-la-Vallée (directeur : Prof. G. Chambaud) puis au laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS de l'Université Paris-Est Marne-la-Vallée (directeur : Prof. C. Soize) à partir de janvier 2008

- Obtention d'un congé pour Recherche délivré par le CNU section 31 de mars à août 2007
- Obtention de la prime d'encadrement doctoral en octobre 2007

Sept. 2000 – Sept. 2001 : Post-doctorat sous la direction du Prof. N.C. Handy Université de Cambridge, U.K. (financé par le réseau européen THEONET II)

Oct. 1997 – Août 2000 : Thèse de Chimie Théorique sous la direction du Prof. P. Rosmus intitulée "Calculs ab initio de données spectroscopiques", Université de Marne-la-Vallée, soutenue le 21 juin 2000 avec la mention "Très honorable avec félicitations"

Oct. 1996 – Juin 1997 : DEA de Physique expérimentale des atomes et des molécules et Applications. Mention "Très Bien". Université de P. et M. Curie, Paris.

- Stage "Etude théorique des niveaux rovibroniques de l'état fondamental de l'ion OCS<sup>+</sup>" sous la responsabilité de Gilberte Chambaud, Université de Marne-la-Vallée, de février à juin 1997

## Production scientifique

Indice H = 15 (scopus), 72 publications.

### Publications de rang A (IF>1) dans des périodiques à comité de lecture

1. Emery N., Bhatia A., Ghaleb Y., Mitrushchenkov A., Léonard C., Pereira-Ramos J.-P., Baddour-Hadjean R., Smith, I. R., Short-range to long-range Ni/Mn order in  $\text{LiMn}_{2-x}\text{Ni}_x\text{O}_4$  ( $0.38 \leq x \leq 0.50$ ) positive electrode material: a gradual temperature-driven sublattice disorder through antiphase boundary defects, *Chemistry of Materials*, 34, 3152–3167 (2022), DOI: doi.org/10.1021/acs.chemmater.1c04281.
2. Bensifia M., Bouanis F., Léonard C., Imidazole Functionalized Graphene and Carbon Nanotubes for  $\text{CO}_2$  detection, *Journal of Molecular Structure*, 1259, 132719 (2022), DOI: 10.1016/j.molstruc.2022.132719.
3. Dieng M., Bensifia M., Borme J., Florea I., Abreu C., Jama C., Léonard C., Alpuim P., Pribat D. Yassar A., Bouanis F., Wet-Chemical Non-Covalent Functionalization of CVD-Graphene: Molecular Doping and its Effect on Electrolyte-gated Graphene Field-Effect Transistor Characteristics, *The Journal of Physical Chemistry C*, 126, 4522–4533 (2022), DOI: 10.1021/acs.jpcc.1c10737.
4. Bouanis F. Z., Bensifia M., Florea I., Mahouche-Chergui S., Carbonnier B., Grande D., Léonard C., Yassar A., Pribat D. Raw and Processed Data used in Non-Covalent Functionalization of Single Walled Carbon Nanotubes with Co-Porphyrin and Co-Phthalocyanine and its Effect on Field-Effect Transistor Characteristics, *Data in Brief*, 38, 107366 (2021), open access, DOI: 10.1016/j.dib.2021.107366.
5. Bouanis F. Z., Bensifia M., Florea I., Mahouche-Chergui S., Carbonnier B., Grande D., Léonard C., Yassar A., Pribat D., Non-covalent functionalization of single walled carbon nanotubes with Fe-co-porphyrin and Co-phthalocyanine for field-effect transistor applications, *Organic Electronics*, 96, 106212 (2021), DOI: 10.1016/j.orgel.2021.106212.
6. Léonard C., Le Quéré F., Adjei D., Denisov S., Mostafavi M., Archirel P., Oxidation of Silver Cyanide  $\text{Ag}(\text{CN})_2^-$  by the OH radical: From Ab initio Calculation to Molecular Simulation and to Experiment, *The Journal of Physical Chemistry A*, 124, 10787–10798 (2020), DOI: 10.1021/acs.jpca.0c08038.
7. Liao M., To Q.-D., Léonard C., Yang W., Prediction of thermal conductance and friction coefficients at a solid-gas interface from statistical learning of collisions, *Physical Review E*, 98, 042104 (2018), DOI: 10.1103/PhysRevE.98.042104
8. Liao M., Grenier R., To Q.-D., de Lara-Castells M.P., Léonard C., Helium and argon interactions with gold surfaces: Ab initio-assisted determination of the He-Au pairwise potential. Application to accommodation coefficients determination, *The Journal of Physical Chemistry C*, 122, 14606–14614 (2018), DOI: 10.1021/acs.jpcc.8b03555.
9. Liao M., To Q.-D., Léonard C., Monchiet V., Non-parametric wall model and methods of identifying boundary conditions for moments in gas flow equations, *Physics of Fluids (Editor's Pick)*, 30, 032008 (2018), DOI : 10.1063/1.5016278.
10. Iwayama H., Léonard C., Le Quéré F., Carniato S., Guillemin R., Simon M., Piancastelli M. N., and Shigemasa E., Different Time Scales in the Dissociation Dynamics of Core-Excited  $\text{CF}_4$  by Two Internal Clocks, *Physical Review Letters*, 119, 203203 (2017), DOI : 10.1103/PhysRevLett.119.203203 (IF : 8.462).
11. Liao M., To Q.-D., Léonard C., Monchiet V., Vo V.-H., Strain-induced friction anisotropy between graphene and molecular liquids, *Journal of Chemical Physics*, 146, 014707 (2017), DOI: 10.1063/1.4973384.

12. Shahrokhi M., Léonard C., Tuning the band gap and optical spectra of silicon-doped graphene: Many-body effects and excitonic states, *Journal of Alloys and Compounds*, 693, 1185-1196 (2017). DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.10.101.
13. Sarka J., Lauvergnat D., Brites V., Császár A.G., Léonard C., Rovibrational energy levels of the F-(H<sub>2</sub>O) and F-(D<sub>2</sub>O) complexes, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 18, 17678-17690 (2016), DOI: 10.1039/C6CP02874H.
14. Shahrokhi M., Léonard C., Quasi-particle energies and optical excitations of wurtzite BeO and its nanosheet, *Journal of Alloys and Compounds*, 682, 254-262 (2016), DOI: 10.1016/j.jallcom.2016.04.288.
15. To Q.-D., Vu V.-H., Lauriat G., Léonard C., Boundary conditions for gas flow problems from anisotropic scattering kernels, *Journal of Mathematical Physics*, 56, 103101 (2015), DOI: 10.1063/1.4933223
16. Grenier R., To Q.-D., de Lara Castells M.P., Léonard C., Argon Interaction with Gold Surfaces: Ab Initio-Assisted Determination of Pair Ar-Au Potentials for Molecular Dynamics Simulations, *Journal of Physical Chemistry A*, 119, 6897-6908 (2015), DOI: 10.1021/acs.jpca.5b03769.
17. Mitrushchenkov A., Brites V., Léonard C., Simulation of the A<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup>-X<sup>2</sup>Π absorption and emission spectra of the SiCCl radical, *Molecular Physics*, 113, 1695-1703 (2015), DOI: 10.1080/00268976.2015.100570 (invited article).
18. To Q.-D., Pham T.T., Brites V., Léonard C., Lauriat G., Multiscale study of gas slip flows in nano-channels, *Journal of Heat Transfer*, 137, 091002 (2015), DOI: 10.1115/1.4030205.
19. To Q.-D., Léonard C., Lauriat G., Free-path distribution and Knudsen-layer modeling for gaseous flows in the transition regime, *Physical Review E*, 91, 023015 (2015).
20. Brites V., Le Quéré F., Léonard C., Ab initio investigations on the CaO<sup>2+</sup> dication, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1052, 1-5 (2015).
21. Brites V., Mitrushchenkov A., Peterson K.A., Léonard C., Ab initio ro-vibronic spectroscopy of SiCCl (X<sup>2</sup>Π), *Journal of Chemical Physics*, 141, 034305 (2014).
22. Khalil H., Le Quéré F., Léonard C., Brites V., Theoretical Investigations on CaO Ions: Vibronic States and Photoelectron Spectroscopy, *Journal of Physical Chemistry A*, 117, 11254-11260 (2013).
23. Brites V., Léonard C., Rovibrational energies of B<sub>2</sub>H<sub>2</sub> (X<sup>3</sup>Σ<sub>g</sub><sup>-</sup>) from an explicitly correlated potential energy surface, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1025, 24-29 (2013).
24. Pham T.T., To Q.-D., Lauriat G., Léonard C., Tensorial slip theory for gas flows and comparison with molecular dynamics simulations using an anisotropic gas-wall collision mechanism, *Physical Review E*, 87, 053012 (2013).
25. Léonard C., Brites V., Pham T.T., To Q.-D., Lauriat G., Influence of the Pairwise Potential on the Tangential Momentum Accommodation Coefficient: a Multi-Scale Study applied to the Argon on Pt(111) System, *European Physical Journal B*, 86, 164 (2013).
26. Brites V., Mitrushchenkov A.O., Léonard C., Study of the X<sup>2</sup>Π State of the SiCN/SiNC Renner-Teller System, *Journal of Chemical Physics*, 138, 104501 (2013).
27. Pham T.T., To Q.-D., Lauriat G., Léonard C., H.V.Vo, Effects of surface morphology and anisotropy on the tangential momentum accommodation coefficient between Pt(100) and Ar, *Physical Review E*, 86, 051201 (2012).

28. Léonard C., Le Quéré F., Theoretical Study of the Predissociation of the  $A^2\Pi$  State of ZnF Including Quasi-Diabatization of the Spin-Orbit Coupling, *Journal of Chemical Physics*, 137, 16 (2012).
29. Brites V., Léonard C., Electronic states, potential energy surface, and theoretical spectroscopy of  $Be_2H_2$ , *Journal of Physical Chemistry A*, 116, 9484-9489 (2012).
30. Brites V., Léonard C., Electronic states and rovibrational spectroscopy of the  $HAIF^+$  and  $HAICl^+$  cations, *Computational and Theoretical Chemistry*, 997, 19-24 (2012).
31. Brites V., Léonard C., CCSD(T)-F12 Investigations on HBNH and its Isotopologues, *International Journal of Quantum Chemistry*, 112, 2051-2061 (2012).
32. Khalil H., Le Quéré F., Brites V., Léonard C., Theoretical Study of the Rovibronic States of CaO, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 271, 1-9 (2012).
33. Khalil H., Brites V., Le Quéré F., Léonard C., Ab initio study of the low-lying electronic states of the CaO molecule, *Chemical Physics*, 386 (1-3), 50-55 (2011).
34. Brites V., Léonard C., Theoretical spectroscopy of the  $HNCl^-$  anion, *Molecular Physics*, 109 (22), 2655-2662 (2011).
35. Brites V., Guitou M., Léonard C.,  $Mg_2H_2$ : New Insight on the Mg-Mg Bonding and Spectroscopic Study, *Journal of Chemical Physics*, 134 (5), 054314 (2011).
36. To Q.D., Bercegeay C., Lauriat G., Léonard C., Bonnet G., A Slip Model for Micro/Nano Gas Flows Induced by Body Forces, *Microfluidics and Nanofluidics*, 8, 417-422 (2010).
37. Jutier L., Léonard C., A New Variational Method for the *Ab Initio* Study in Valence Coordinates of the Renner-Teller Effect in Tetra-Atomic Systems, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 6, 1565-1579 (2010).
38. Léonard C., Gritli H., Chambaud G., New Study of the Stability and of the Spectroscopy of the Molecular Anions  $NCO^-$  and  $CNO^-$ , *Journal of Chemical Physics*, 133, 124318 (2010).
39. Jutier L., Léonard C., F. Gatti, Renner-Teller effect in Linear Tetra-Atomic Molecules: II. Rovibronic Levels Analysis of the  $X^2\Pi_u$  Electronic State of  $HCCH^+$ , *Journal of Chemical Physics*, 130, 134302 (2009).
40. Jutier L., Léonard C., F. Gatti, Renner-Teller effect in Linear Tetra-Atomic Molecules: I. Variational Method Including Couplings between all Degrees of Freedom on Six-Dimensional Potential Energy Surfaces, *Journal of Chemical Physics*, 130, 134301 (2009).
41. Hayashi S., Léonard C., Chambaud G., *Ab Initio* Study of  $HZnF$ , *Journal of Physical Chemistry A*, 113, 14615-14624, (2009).
42. Léonard C., Chambaud G., *Ab Initio* Study of the First Excited State  $A^2\Sigma^+$  and of the Transition  $A^2\Sigma^+ \leftarrow X^2\Pi$  of  $CNO$ , *Chemical Physics Letters*, 458, 24-28 (2008).
43. Hayashi S., Léonard C., Chambaud G., *Ab Initio* Study of the Low Lying Electronic States of  $ZnF$  and  $ZnF^-$ , *Journal of Chemical Physics*, 129, 044313 (2008).
44. Pasin G., Iung C., Gatti F., Richter F., Léonard C., Meyer H.-D., Theoretical Investigation in  $HFCO$  and  $DFCO$  Induced by an External Field, *Journal of Chemical Physics*, 129, 144304 (2008).
45. Léonard C., Diehr M., Rosmus P., Maguire W., Radiative transition probabilities in the  $X^2\Pi_g$  state of  $CO_2^+$ , *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109, 535-548 (2008).

46. Richter F., Gatti F., Léonard C., Le Quéré F., Meyer H.-D., Time-dependent wave packet study on trans-cis isomerisation of HONO with an external field, *Journal of Chemical Physics*, 127, 164315 (2007).
47. von Lilienfeld O.A., Léonard C., Handy N.C., Carter S., Willeke M.B., Quack M., Density functional calculations for the spectroscopic properties of CCl<sub>3</sub>F, *Physical Chemistry and Chemical Physics*, 9, 5027-5035 (2007).
48. Léonard C., Gritli H., Chambaud G., Ab initio study of the spectroscopy of the X<sup>2</sup>Π electronic states of CNO and NCO, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 243, 90-98 (2007).
49. Jutier L., Léonard C., Ab initio study of the C<sub>2</sub>O<sup>+</sup> cation, *Molecular Physics*, 105, 1105-1114 (2007).
50. Soorkia S., Le Quéré F., Léonard C., Figgen D., Ab initio study of the spin-orbit coupling between the A<sup>1</sup>Σ<sub>u</sub><sup>+</sup> and b<sup>3</sup>Π<sub>u</sub> electronic states of Na<sub>2</sub>, *Molecular Physics*, 105, 1095-1104 (2007).
51. Meyer H.-D., Le Quéré F., Léonard C., Gatti F., Calculation and selective population of vibrational levels with the multi-configuration time dependent hartree (MCTDH) algorithm, *Chemical Physics*, 329, 179-192 (2006).
52. Léonard C., Le Quéré F., Peterson K.A., A theoretical spectroscopic study of HeI and HeBr, *Physical Chemistry and Chemical Physics*, 7, 1694-1699 (2005).
53. Léonard C., Chambaud G., Carter S., Spin-orbit coupling in the X<sup>2</sup>Π state of NCS, *Chemical Physics Letters*, 398, 123-129 (2004).
54. Léonard C., Carter S., Handy N.C., The Barrier to Inversion of Ammonia, *Chemical Physics Letters*, 370, 360-365 (2003).
55. Léonard C., Carter S., Handy N.C., Theoretical Determination of the Vibrational Levels of NH<sub>3</sub><sup>+</sup> with MULTIMODE, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 4, 4087-4095 (2002).
56. Léonard C., Handy N.C., Carter S., Bowman J.M., The Vibrational Levels of Ammonia, *Spectrochimica Acta Part A*, 58, 825-838 (2002).
57. Léonard C., Carter S., Handy N.C., Knowles P.J., Theoretical Determination of the Vibrational Levels of NH<sub>3</sub><sup>+</sup> and its Isotopomers. *Molecular Physics*, 99, 1335-1346, (2001).
58. Léonard C., Panten D., Rosmus P., Wyss M., Maier J.P., Theoretical Study of the A<sup>2</sup>Σ<sup>+</sup> - X<sup>2</sup>Π Transition of CCO<sup>-</sup>, *Collection of Czechoslovak Chemical Communications*, 66, 983-990 (2001).
59. Léonard C., Panten D., Lakin N.M., Chambaud G., Rosmus P., A Theoretical Study of the Renner-Teller effect in the X<sup>2</sup>Π<sub>g</sub> State of C<sub>3</sub><sup>-</sup>, *Chemical Physics Letters*, 335, 97-104 (2001).
60. Léonard C., Panten D., Rosmus P., Wyss M., Maier J.P., Theoretical Study of the A<sup>1</sup>Π - X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup> Transition in C<sub>2</sub>B<sup>-</sup>, *Chemical Physics*, 264, 267-273 (2001).
61. Léonard C., Chambaud G., Rosmus, Carter S., Handy N.C., The Selective Population of the Vibrational Levels of Thioformaldehyde, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 3, 508-513 (2001).
62. de Lara Castells M.P., Mitrushenkov A., Palmieri P., Le Quéré F., Léonard C., Rosmus P., Spin-dependent and Coriolis Interactions by an Improved Configuration Interaction Treatment: Predissociation of Excited Fine Structure Levels of OH/OD, *Molecular Physics*, 98, 1713-1727 (2000).
63. Léonard C., Chambaud G., Rosmus, Carter S., Handy N.C., Wyss M., Maier J.P., Large Amplitude Motion in the X<sup>2</sup>A<sub>1</sub> State of C<sub>2</sub>B, *Journal of Chemical Physics*, 113, 5228-5234 (2000).

64. Léonard C., Le Quéré F., Rosmus P., Puzzarini C., de Lara Castells M.P., Selective Vibrational Excitations in the OX (X = F, Cl, Br, I) Molecules, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2, 1117-1122 (2000).
65. Hochlaf M., Léonard C., Ferguson E., Rosmus P., Reinsch E.-A., Carter S., Handy N.C., Potential Energy Function and Vibrational States of N<sub>2</sub>CO<sup>+</sup>, *Journal of Chemical Physics*, 111, 4948 (1999).
66. Léonard C., Rosmus P., Wyss M., Maier J.P., Bound Electronic States X<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>, a<sup>3</sup>Π and A<sup>1</sup>Π of C<sub>2</sub>B<sup>-</sup>, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 1, 1827 (1999).
67. Léonard C., Rosmus P., Carter S., Handy N.C., Potential Energy Function and Vibrational states of the Electronic Ground State of N<sub>4</sub><sup>+</sup>, *Journal of Physical Chemistry A*, 103, 1846 (1999).
68. Stimson S., Evans M., Ng C.Y., Hsu C.-W., Heimann P., Destandau C., Rosmus P., High Resolution Vacuum Ultraviolet Pulsed Field Ionization Photoelectron Band for OCS<sup>+</sup>: An Experimental and Theoretical Study, *Journal of Chemical Physics*, 108, 6205 (1998).
69. Destandau C., Chambaud G., Rosmus P., Electronic States of the CS<sup>+</sup> Ion, *Journal de Chimie Physique*, 94, 1794 (1997).

#### **Autre publication :**

1. To Q.-D., Pham T.T., Lauriat G., Léonard C., Molecular Dynamics simulations of pressure driven flows and comparison with acceleration driven flows, *Advances in Mechanical Engineering*, 580763 (2012).

#### **Articles de vulgarisation :**

1. Bouanis F., Carbonnier B., Grande D., Mahouche-Chergui S., Bensifia M., Léonard C., Mitrushchenkov A., Nicolas X., Trouette B., Halim Atallah G., Vincent S., Détection et suivi de petites molécules polluantes dans l'air ambiant, *l'Actualité Chimique*, 25-30, 453 Juillet-Août (2020).
2. Léonard C., Carbonnière Ph., Boudon V., Gabard T., Talbi D., La modélisation des vibrations des molécules : enjeux et applications, *Edition spéciale de l'Actualité Chimique*, 49-55, 382-383 Février-Mars (2014).

#### **Proceedings :**

1. Bouanis F., Carbonnier B., Grande D., Mahouche-Chergui S., Bensifia M., Léonard C., Mitrushchenkov, Nicolas X., Trouette B., Halim Atallah G., Vincent S., Développement multi-échelle d'un dispositif de détection et de suivi de petites molécules polluantes dans l'air ambiant, *Visioconférence, FUTRE Days, France*, 1-3 décembre, 2020.
2. To Q.D., Vu V.H., Lauriat G., Léonard C., Velocity slip and temperature jump for gas flows past anisotropic surfaces: analytical derivation and numerical simulation. ICNMM2016, Washington, 2016. Paper No. ICNMM2016-7924, pp. V001T01A002, 3 pages. doi:10.1115/ICNMM2016-7924
3. To Q.-D., Lauriat G., Léonard C., On the free path distribution and Knudsen layer modeling, *HTFFM-V, the 5 th International Conference on Heat Transfer and Fluid Flow in Microscale*, Marseille, France, April 22-26, 2014
4. To Q.-D., Pham T.T., Brites V., Léonard C., Lauriat G., Multiscale study on gas slip flows in nanochannels, *4th ASME Micro/Nanoscale Heat & Mass Transfer International Conference*, Hong-King, Chine, December 11-14, 2013

5. Pham T.T., To Q.-D., Lauriat G., Léonard C., Vo V.H., Temperature, surface roughness and anisotropy effects on the tangential momentum accommodation coefficient between Pt(100) and Ar. *Proceedings of the 3rd European Conference on Microfluidics - Microfluidics 2012*, Heidelberg, Germany, December 3-5, 2012
6. To Q.D., Bercegeay C., Lauriat G., Léonard C., Bonnet G., A Slip Model for Micro/Nano Gas Flows Induced by Body Forces. *Workshop "Molecular Photoreactivity on Metal-Oxide Surfaces from First-Principles"*, Madrid, Espagne, décembre 2009
7. Gritli H., Léonard C., Chambaud G., Modelisation of the electron - molecule interaction in the [C,N,O] system. *Molecules in Space and in Laboratory*, Paris, France, mai 2007, ed. J.L. Lemaire and F. Combes (Paris)

#### Conférences invitées internationales :

1. Léonard C., Examples of high quality Potential Energy Surfaces for Dynamics Applications, Quantum Dynamics with the Multi-Configuration Time-Dependent Hartree (MCTDH) method: future and perspectives, Orsay, France, September 25–October 20, 2017.
2. Léonard C., Examples of high quality Potential Energy Surfaces for Dynamics Applications, COST MOLIM Workshop on Intermolecular Interactions, Santiago de Compostela, Spain, October 2-4, 2017.
3. Léonard C., de Lara-Castells M.P., Grenier R., To Q.-D., Multi-step multi-scale ab-initio-assisted modelling: gas flows between solid walls, COST MOLIM working group 3 meeting, Bratislava, Slovakia, March 21-22, 2016.
4. Léonard C., de Lara-Castells M.P., Grenier R., To Q.-D., Studies of the Interactions of He and Ar with a Gold Surface, *Helium-mediated Synthesis, Soft-landing and Spectroscopy of Metal Nanoparticles on Surfaces HeSSSMe 2014*, Madrid, Spain, October 10-11, 2014.
5. Léonard C., Brites V., Tarroni R., Clouthier D.J., The Renner-Teller effect in floppy chains molecules, *Convergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy CoDECS 2013 workshop*, Madrid, Spain, April 18-22, 2013.
6. Léonard C., Ro-vibrational Spectroscopy in Tetra-Atomic Renner-Teller Molecules, *Third French Chinese Workshop in Theoretical Chemistry*, La Colle-Sur-Loup, France, October 10-12, 2011.
7. Léonard C., Ro-vibrational spectroscopy in tetra-atomic Renner-Teller molecules, *The 4th Sino-French Workshop on Molecular Spectroscopy, Dynamics and Quantum Control*, China, Hefei, October 22-26, 2008.
8. Léonard C., Ab initio study of the spectroscopy of  $\text{CCO}^+$  and  $\text{OCCO}^+$ , *2nd Workshop on High dimensional quantum dynamics: challenges and opportunities*, La Grande Motte, France, February 25-28, 2008.

#### Conférences invitées nationales :

1. Des calculs ab-initio aux méthodes des milieux continus : Modélisation des phénomènes d'interface pour le transport, Rencontres prospectives 2019 du RFCT : Modélisations multi-échelles, Nantes, 11-13 juin, 2019.
2. Effet Renner-Teller dans les molécules tetra-atomiques linéaires et linéaires-plies, *Colloque commun de la division de Physique Atomique et Moléculaire et Optique de la SFP et des Journées de Spectroscopie Moléculaire*, Metz, 3-6 juillet, 2012.
3. Spectroscopie rovibrationnelle au LCT de l'UMLV, *Journées Modélisation de l'ENS-ENSCP*, Paris, France, juin, 2006.

## Conférences :

1. Bouanis F., Carbonnier B., Grande D., Mahouche-Chergui S., Bensifia M., Léonard C., Mitrushchenkov, Nicolas X., Trouette B., Halim Atallah G., Vincent S., Développement multi-échelle d'un dispositif de détection et de suivi de petites molécules polluantes dans l'air ambiant, Visioconférence, FUTRE Days, France, 1-3 décembre, 2020.
2. Léonard C., Ab initio rovibrational spectroscopy in tetra-atomic molecules, *Cost Action CODECS Meeting, TheTIS, Theoretical Tools for In Silico Spectroscopy*, Paris, April 13-15, 2011.
3. Léonard C., Theoretical Study of the Predissociation of the  $A^2\Pi$  States of ZnF Including Quasi-Diabatisation of the Spin-Orbit Coupling, *International Meeting on Atomic and Molecular Physics and Chemistry*, Madrid, Spain, June 29- July 2, 2010.
4. Léonard C., Probabilités de transitions radiatives dans les niveaux rovibroniques de  $\text{CO}_2^+$ , *Colloque commun de la division de Physique Atomique et Moléculaire et Optique de la SFP et des Journées de Spectroscopie Moléculaire (PAMO-JSM)*, Orsay, 29 Juin-2 Juillet, 2010.
5. Léonard C., Modélisation de l'interaction électron-molécule dans le système [C,N,O], *11ème Rencontre des Chimistes Théoriciens Français*, Dinard, France, 30 juin-4 juillet, 2008.
6. Léonard C., Ab initio study of the  $X^2\Pi \rightarrow A^2\Sigma^+$  transition in CNO, *Theoretical Tools for In-silico Spectroscopy workshop*, Paris, France, February 14-16, 2008.
7. Léonard C., Rôle du couplage spin-orbite dans les états vibrationnellement excités. Exemple : l'état  $X^2\Pi$  de NCS, *Congrès SPECMO*, Dunkerque, France, juin 2004
8. Léonard C., The determination of the vibrational levels of ammonia, *Congrès THEONET*, Helsinki, Finlande, septembre 2001
9. Léonard C., Potential energy functions and spectrum of  $\text{OCS}^+$ , *Congrès THEONET*, Meudon, France, avril 1998

## Séminaires :

1. Transitions et durées de vie radiatives dans les niveaux rovibroniques de  $\text{CO}_2^+$  et  $\text{CO}_2$ . ENSCP, Paris, France, avril 2006
2. Obtentions de données spectroscopiques. LSDSMS, Université de Montpellier II, France, avril 2004
3. Theoretical determination of the vibrational levels of  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{ND}_3^+$ . Comparison between MULTIMODE and SPECTRO. Department of Chemistry, University of Cambridge, U.K., mars 2001
4. Theoretical determination of the vibrational levels of  $\text{NH}_3^+$  and  $\text{ND}_3^+$ . Comparison between MULTIMODE and SPECTRO. LCT, Université de Marne-la-Vallée, France, février 2001
5. Methodes dépendant du temps en Chimie Théorique. CERMICS, Ecole des ponts et Chaussées, Champs-sur-Marne, France, mars 1999

## Interventions orales invitées :

Présentations du Réseau Français de Chimie Théorique :

1. Coupled with the presentation of MOLPRO, *Atomic and molecular calculation softwares on massivey parallel machines: present and future*, TGCC, Bruyères-le-Chatel, France, 10-11 juin 2015.

2. *5<sup>th</sup> Chinese-French Workshop in Theoretical Chemistry*, Strasbourg, France, May 10-13, 2015.
3. *29<sup>èmes</sup> Journées de l'Innovation et de la Recherche dans l'Enseignement de la Chimie sur Enseigner une chimie économe et créatrice*, Marne-la-Vallée, France, 21-24 mai 2013.

## Animation scientifique :

**Directrice du laboratoire de Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS (Tutelles : Univ Gustave Eiffel, Univ Paris-Est Créteil, CNRS), depuis janvier 2020.**

Responsable de la transversalité, membre du directoire et du conseil du laboratoire MSME de septembre 2013 à décembre 2019.

Membre du comité de direction du labex MMCD (Modélisation et Expérimentation Multi-échelles des Matériaux pour la Construction Durable 2012-2019, puis 2020-2024).

- Responsable du projet structuré 4 (surfaces et interfaces) **depuis janvier 2020**
- Responsable de l'axe 1 (Multi-physique des matériaux nano-structurés : élaboration, caractérisation et simulation numérique) de janvier 2016 à décembre 2019.

Responsable du projet Isite et transversal : CAPTEUR **depuis janvier 2018**. La partie MSME de projet regroupe 5 permanents et 2 doctorants. La partie expérimentale est portée par F. Bouanis IFSTTAR-LISIS en partenariat avec l'ICMPE de l'UPEC.

Responsable du projet transversal (TCM-CT-MECA): Modélisations atomistiques et moléculaires des collisions gaz-parois et simulations numériques d'écoulements dans des micro-conduites (MIG), suite du projet Milieux microporeux de janvier 2014 à octobre 2017. Ce projet a regroupé 5 permanents, 1 professeur émérite et 5 doctorants.

## Encadrement post-doctoral :

1. Encadrement de l'ATER du Dr Mohamed Bensifia portant sur "L'interaction molécules sur des surfaces" de septembre 2022 à août 2023.
2. Co-encadrement du post-doc du Dr Shcheblanov Nikita, portant sur "Étude par simulation moléculaire des mécanismes de croissance et de la microstructure de films poreux produits par dépôt physique en phase vapeur en vue de la possible formulation de surface hybrides organiques-inorganiques", financé par le LabEx MMCD d'avril 2022 à octobre 2023, en collaboration avec A. Lemaître (NAVIER) et Q.-D. To (TCM).
3. Co-encadrement du post-doc du Dr Vu Van Huyen, portant sur "Développement d'une modélisation multi échelle couplant les approches continue et moléculaire pour simuler les transferts de chaleur et de masse dans des micro/nano conduites de gaz" financé par le CNRS, de janvier à septembre 2017, en collaboration avec B. Trouette (TCM), Q.-D. To (TCM).
4. Co-encadrement du post-doc du Dr Shahrokhi Masoud, portant sur "Multiscale chemo-mechanical modeling of graphene coated materials" financé par le labex MMCD, d'avril 2015 à mars 2016, en collaboration avec J. Yvonnet (MECA), A. Mitrushchenkov (TC) et G. Stoltz (CERMICS, Ecole des ponts ParisTech).
5. Encadrement de l'ATER du Dr Tahra Ayed portant sur "Etude de la réactivité de  $\text{Ca} + \text{N}_2\text{O} \rightarrow \text{CaO} + \text{N}_2$ " de décembre 2014 à août 2015.
6. Encadrement de l'ATER du Dr Vincent Brites portant sur "Etudes de spectroscopie à haute résolution et les calculs d'interaction molécule-surface" de septembre 2010 à août 2011.

## Encadrement doctoral :

1. Co-encadrement (30%, avec M.-A. Chadil et Jamal Chaouki (PR, Montréal Polytechnique)) de la thèse de M. Hakkoum Abdelhamid, portant sur "Modélisation multi-échelle par la simulation numérique du reformage à sec du méthane assisté par micro-ondes pour la production d'Hydrogène" depuis octobre 2022.

2. Co-encadrement (20%, avec Q.D. To et V. Monchiet) de la thèse de M. Gbocho Soboh, portant sur "Approche multi-échelle pour caractériser les interactions fluide-solide à l'interface et homogénéisation numérique des milieux poreux" depuis octobre 2021.
3. Directrice de la thèse de M. Mohamed Bensifia, intitulée "Développements théoriques de nouveaux dispositifs de détection de gaz" depuis octobre 2018, soutenance prévue le 14 juin 2022.
4. Co-encadrement (30%, avec Q.D. To et V. Monchiet) de la thèse de M. Liao Meng, portant sur "Modeling of fluid flows and heat transfer with interface effects, from molecular interaction to porous media" d'octobre 2015 à septembre 2018, soutenue le 28 septembre 2018. Prix de thèse de la COMUE Université Paris-Est.
5. Directrice de la thèse (90%) de M. Romain Grenier, intitulée "Etude multi-échelle des phénomènes physico-chimiques aux interfaces gaz-surfaces métalliques" d'octobre 2012 à octobre 2015, soutenue le 26 octobre 2015.
6. Directrice de la thèse de M. Hossain Khalil, intitulée "Highly Accurate Studies of the Rovibronic States of Small Size Radicals" d'octobre 2008 à mai 2012, soutenue le 14 mai 2012.
7. Co-encadrement (75%) de la thèse de M. Laurent Jutier avec le Prof. P. Rosmus (25%), intitulée "Renner-Teller Effect in Tri- and Tetra-Atomic Molecules" d'octobre 2005 à septembre 2009, soutenue le 11 septembre 2009.

## **Encadrement de stages de Master :**

### **M1, maîtrise**

1. Co-encadrement du stage de Master 1<sup>ère</sup> année de M. Adama Gassama : "Etude de la diffusion des ions  $\text{Li}^+$  dans les structures spinelles  $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$ ", de mars à juillet 2022.
2. Co-encadrement (20%) du stage filé de Master 1<sup>ère</sup> année de Mme Mohammadi Sabine : "Modélisation des interactions entre du graphène fonctionnalisé et une molécule de  $\text{CO}_2$  à l'échelle atomique", avec Mohamed Bensifia, de janvier à juin 2020.
3. Encadrement du stage de Master 1<sup>ère</sup> année de M. Karim Bouarar : "Modélisation de l'action des CFC dans les processus physico-chimiques de l'atmosphère", de mai à juin 2015.
4. Co-encadrement (50%) du stage de Master 1<sup>ère</sup> année de M. Nicolas Le Troquer : "Etude ab initio de l'interaction d'un atome d'argon avec une surface d'or" avec Vincent Brites, de mai à juin 2011.
5. Co-encadrement (50%) du stage de Master 1<sup>ère</sup> année de Mme Nadège Kouassi : "Etude du couplage spin-orbite dans la prédissociation des niveaux rovibroniques de  $\text{ZnF}$ " avec Frédéric Le Quéré, de mai à juillet 2009.
6. Co-encadrement (50%) du stage de Master 1<sup>ère</sup> année de M. Satchin Soorkia : "Etude du couplage spin-orbite dans les niveaux vibrationnels des états électroniques  $A^1\Sigma_u^+$  et  $b^3\Pi_u$  de  $\text{Na}_2$  couplés ", avec Frédéric Le Quéré, de mai à juillet 2004.

### **M2, DEA**

1. Co-encadrement du stage de Master 2<sup>ème</sup> année de M. Benrkia Youssef : "Fonctionnalisation de matériaux 2D par des métalloporphyrines et métallophthalocyanines pour le développement de capteurs de gaz", de mai à octobre 2021.

2. Co-encadrement du stage de Master 2ème année de M. Yanis Ghaleb : "Etude de la diffusion des ions  $\text{Li}^+$  dans les structures spinelles  $\text{LiMn}_{1.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$ ", de mars à juillet 2020.
3. Encadrement du stage de Master 2ème année de M. Mohamed Bensifia : "Modélisation des interactions entre un nano-tube de carbone fonctionnalisé et des molécules de gaz à l'échelle atomique", de mars à juillet 2018.
4. Co-encadrement (30%) du stage de Master 2ème année de M. Vu Van Binh : "Simulation des écoulements de fluides binaires", avec Quy-Dong To, de mars à juillet 2014.
5. Encadrement du stage de Master 2ème année de M. Grenier Romain : "Détermination du potentiel d'interaction du couple Ar-Au(111) et utilisation de ce potentiel pour obtenir le coefficient d'accommodation tangentiel par dynamique moléculaire", de mars à juillet 2012.
6. Co-encadrement (50%) du stage de Master 2ème année de M. Algouti Zakaria : "Détermination de potentiels d'interaction entre molécules et des surfaces métalliques ou d'oxydes métalliques, et déduction de paramètres pour des études de dynamique et de spectroscopie des molécules adsorbées" en collaboration avec Marie Guitou, de mars à juin 2010.
7. Encadrement du stage de Master 2ème année de M. Hossain Khalil : "Etude de la structure électronique et de la spectroscopie rovibrationnelle du complexe  $[\text{H,Ca,O}]$ ", de février à juin 2008.
8. Co-encadrement (50%) du stage de Master 2ème année de M. Hicham Hamoudi : "Etude DFT des états excités des monomères XH avec  $X=\text{F, Cl, Br}$  et comparaison avec la méthode MRCI" avec C. Adamo de l'ENSCP, de février à juin 2006.
9. Encadrement du stage de Master 2ème année de M. Laurent Jutier : "Calculs ab initio des courbes d'énergie potentielle et de données spectroscopiques de l'ion  $\text{C}_2\text{O}^+$ ", de mars à juin 2005.
10. Co-encadrement (50%) du stage de DEA de M. Safwat Abdel Azeim : "Etude des effets électroniques influençant la levée de dégénérescence au pliage des états II des molécules linéaires, application à NCO" avec G. Chambaud, de février à juin 2003.
11. Participation à l'encadrement du "Diploma thesis" de M. Otto Anatole von Lilienfeld-Toal : "Anharmonic Potential Surface and Vibrational Spectrum of  $\text{CFCl}_3$ " avec Nicholas C. Handy, d'avril à juin 2001.

### **Participation à des jurys de HDR :**

1. Présidente du jury de l'habilitation à diriger des recherches de M. A. Mitrushchenkov, soutenue le 13 janvier 2021, Université Gustave Eiffel, intitulée "La spectroscopie moléculaire : des petites molécules aux systèmes environnés".
2. Rapporteur de l'habilitation à diriger des recherches de M. G. Dhont, soutenue le 17 décembre 2020, Université du Littoral Côte d'Opale, intitulée "Analyse quantitative et analyse qualitative des systèmes moléculaires".
3. Rapporteur de l'habilitation à diriger des recherches de Mme F. Agostini, soutenue le 29 janvier 2020, Université Paris-Saclay, intitulée "Excited-state Molecular Dynamics : Insights and Trajectory-based Algorithms".
4. Examinatrice de l'habilitation à diriger des recherches de Mme M. Guitou, soutenue le 9 décembre 2016, Université de Paris-Est, intitulée "Chimie quantique appliquée aux systèmes métalliques".
5. Examinatrice de l'habilitation à diriger des recherches de M. Q.-D. To, soutenue le 24 juin 2014, Université de Paris-Est, intitulée "Contributions aux calculs multi-physiques et multi-échelles des fluides, solides et de leurs interfaces".

## Participation à des jurys de thèse :

1. Présidente du jury de la thèse de Y. Toledo Gonzalez, soutenue le 07 décembre 2022, Université de Pau et des pays de l'Adour, intitulée "Modélisation moléculaire pour l'étude des propriétés catalytiques de foldamères hélicoïdaux à base d'urée" dirigée par Ph. Carbonnière et J.-M. Sotiropoulos.
2. Rapporteur de la thèse de Mme C. Herrero, soutenue le 14 octobre 2021, Université de Lyon, intitulée " Hydrodynamics and Energy Conversion in Nanofluidic Systems: A Molecular Perspective" dirigée par L. Joly.
3. Examinatrice de la thèse de M. A. Coste, soutenue le 13 novembre 2019, Université de Montpellier, intitulée "Modélisation moléculaire de solutions silicatées en milieux alcalins" dirigée par M. Duvail et J.-F. Dufrêche.
4. Présidente du jury de la thèse de M. S. Tromp, soutenue le 11 juillet 2018, Université de Lyon (INSA Lyon), intitulée "Lubrification with a refrigerant: an industrial challenge investigated through multiscale modeling based on fluid/surface chemistry" dirigée par N. Fillot et L. Joly.
5. Examinatrice de la thèse de Mme P. Simmonin, soutenue le 27 septembre 2017, Université Pierre et Marie Curie, intitulée "Transport de fluides dans des nanopores : des modèles moléculaires aux modèles continus" dirigée par B. Rotenberg.
6. Rapporteur de la thèse de Mme P. Bacle, soutenue le 22 septembre 2017, Université Pierre et Marie Curie, intitulée "Organisation et dynamique d'espèces chargées au voisinage de surfaces solides par modélisation de l'échelle atomique à l'échelle microscopique" dirigée par V. Mary.
7. Rapporteur et présidente du jury de la thèse de Mme J. Srour, soutenue le 14 décembre 2016, Université de Lorraine, intitulée " Structure électronique et compétition de phases dans les semi-conducteurs Cu-(In,Ga)-Se, Ga-Se et In-Se : Calculs premiers principes basés sur divers potentiels d'échange-corrélation" dirigée par F. El Haj Hassan et d'A. Postnikov.
8. Examinatrice de la thèse de M. R. Li, soutenue le 11 octobre 2016, Université de Pau et des pays de l'Adour, intitulée "Theoretical investigation of electronic properties of atomic clusters in their free forms and adsorbed on functionalized graphene support" dirigée par Ph. Carbonnière et P. Karamanis.
9. Rapporteur de la thèse de M. A. Ilemane, soutenue le 10 décembre 2015, Université de Nice Sophia Antipolis, intitulée "Développements autour de la méthode d'interactions de configurations en champ effectif" dirigée par P. Cassam-Chenaï.
10. Rapporteur de la thèse de Mme I. Oueslati, soutenue le 13 avril 2015, Université Pierre et Marie Curie, intitulée "Etude théorique de la formation catalytique de petites molécules sur des modèles de grains interstellaires" dirigée par B. Kerkeni, L. Tchang-Brillet et A. Spielfiedel.
11. Rapporteur de la thèse de Mme S. Engin, soutenue le 4 novembre 2013, Université Pierre et Marie Curie, intitulée "Etude théorique du contrôle de la dissociation moléculaire par impulsion laser et spectroscopie de photoélectrons" dirigée par S. Carniato.
12. Rapporteur de la thèse de M. L. Joubert-Doriol, soutenue le 7 novembre 2012, Université de Montpellier II, intitulée "Contrôle de la photochimie du benzopyrane. Elaboration d'une stratégie théorique couplant chimie quantique et dynamique quantique" dirigée par F. Gatti et B. Lasorne.

## **Thèses du laboratoire MSME**

1. Présidente du jury de la thèse de M. V.H. Vu, soutenue le 13 décembre 2016, Université de Paris-Est, intitulée "Modélisation hybride et multi-échelle pour la simulation des écoulements et des transferts thermiques dans les micro-canaux" dirigée par E. Chenier.
2. Examinatrice de la thèse de M. T.T. Pham, soutenue le 25 septembre 2013, Université de Paris-Est, intitulée "Multiscale modelling and simulation of slip boundary conditions at fluid-solid interfaces" dirigée par G. Lauriat et Q.-D. To.
3. Examinatrice de la thèse de M. S. Hayashi, soutenue le 11 décembre 2008, Université Paris-Est Marne-la-Vallée, intitulée "Theoretical study of electronic structure and spectroscopy of molecules containing metallic atoms" dirigée par G. Chambaud.

## **Participation à des comités de suivi individuel de thèse :**

1. Thèse de M. M. Zemmouche, intitulée "Étude QM/MM de systèmes bioluminescents ", dirigée par I. Navizet, Université Paris-Est, mars 2019.

## **Participation à des jurys de concours de l'école doctorale pour l'attribution de contrats doctoraux :**

1. Membre du Conseil de l'ED Sciences, Ingénierie et Environnement n° 531, Paris-Est Sup, depuis janvier 2020
2. Concours ED 2MIB n°751 - Pôle CPBA - Chimie Physique, Biologique et Analytique, Université Paris-Saclay, mai 2019

## **Contrats :**

1. Partenaire du projet ComUE Université Paris-Est « Couplage Expériences/Théorie pour de meilleures batteries Li-ion », porteur N. Emery, ICMPE, UPEC, 35.000 euros pour 2021-2022. (17.000 euros pour MSME).
2. BQR UPEM de 1300 euros pour l'achat du logiciel CRYSTAL 17 dans le cadre du projet CAPTEUR.
3. Co-porteur du projet I-site Impulsion « CAPTEUR » avec F. Bouanis, IFSTTAR-LISIS, 60.000 euros pour 2018-2021. En partenariat avec l'ICMPE, UPEC. (24.000 euros pour MSME) + AIMCI : 7000 euros pour 2021-2022 pour des missions et une conférence.
4. Co-responsable du GDR3333-Réseau Français de Chimie Théorique du CNRS avec X. Assfeld, Université de Lorraine (2014-2017), environ 15 000 euros par an.
5. Obtention de 12 mois d'un contrat post-doctoral CNRS pour la thématique transverse MIG à partir du 01/05/2016 « Development of a multiscale modeling coupling continuum and molecular approaches in order to simulate the heat and mass transfers of gas in nano-/microtubes » en collaboration avec Benoît Trouette et Quy Dong To (TCM)
6. LabEx Modélisation & Expérimentation pour la Construction Durable (MMCD)
  - 2021 : obtention de 18 mois de post-doc (Nikita Shcheblanov)
  - 2014 : obtention d'un an de post-doc (Masoud Shahrokhi)
  - 2014 : obtention de 50 000 euros pour l'achat d'une machine massivement parallèle
  - 2015 : obtention de 24 300 euros pour l'achat du complément à la machine parallèle et d'un serveur de stockage

7. Projet Pluriannuel Structurant de l'UPEMLV de 190 000 euros de 2011 à 2013 en 3 axes :

- Au niveau du Laboratoire MSME par un renforcement des activités connectant chimie théorique et nano-mécanique (mécanique des solides pour les problèmes des structures aux petites échelles et propriétés des nanofils).
- Au niveau national avec la continuation du portage du Réseau Français de Chimie Théorique.
- Au niveau national et international par l'implication structurelle de l'Université Paris-Est Marne-la-Vallée dans le CECAM (Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire).

Porteurs du projet : C. Léonard et J. Yvonnet du laboratoire MSME

8. Projet de recherche financé par l'ANR de 2006 à 2009 : Structure électronique et dynamique de systèmes moléculaires complexes (SEDSMC). 240 000 euros

F. Gatti (Porteur, Université de Montpellier II), I. Burghardt (École Nationale Supérieure), C. Léonard, F. Le Quéré (Université de Marne-la-Vallée), R. Marquardt (Université de Strasbourg), C. lung (Université de Montpellier II) et H.-D. Meyer (Universität Heidelberg, Allemagne).

### Collaborations scientifiques :

France	G. Dhont de l'Université du Littoral Côte d'Opale à Dunkerque F. Gatti de l'Université de Montpellier II D. Lauvergnat de l'Université Paris-Sud M. Simon de l'Université Pierre et Marie Curie M. Briant du CEA Saclay
Allemagne	D. Figgen, Universität Stuttgart H.-D. Meyer, Universität Heidelberg
Angleterre	N.C. Handy et S. Carter, University of Cambridge P.J. Knowles, University of Cardiff
Hongrie	A. Császár, Eötvös University, Budapest
Italie	R. Tarroni, P. Palmieri, Università di Bologna
Espagne	M.P. de Lara Castells, CSIC, Madrid
Suisse	J.P. Maier, University of Basel
Tunisie	H. Gritli, Faculté des Sciences de Tunis
U.S.A.	K.A. Peterson, Washington State University J.M. Bowman, Emory University, Atlanta W.C. Maguire, NASA D.J. Clouthier, University of Kentucky

Participation à l'action COST CODECS (COnvergent Distributed Environment for Computational Spectroscopy) de 2010 à 2014 en tant que Manageur Comitee Substitute [CM1002 FR] (voir [http://www.cost.eu/domains\\_actions/cmst/Actions/CM1002](http://www.cost.eu/domains_actions/cmst/Actions/CM1002) et <http://codecs.sns.it/>).

Participation à l'action COST MOLIM (MOLEcules In Motion) de 2015 à 2019 (voir [http://www.cost.eu/COST\\_Actions/cmst/CM1405](http://www.cost.eu/COST_Actions/cmst/CM1405) et <http://cost-molim.eu/>).

Co-Responsible of Task Group "Development of First-Principle Force Fields for Molecular Dynamics and Quantum-Monte-Carlo Simulations" of Working Group 3 "Algorithm Development and High-performance Computing" led by M. P. de Lara Castells (CSIC Madrid) of COST Action CM1405 MOLIM "Molecules in Motion".

### **Invitations à l'UPEM :**

1. Pr. Oleg Prezhdo, University of Washington, U.S.A., 10 juin 2011 - 10 juillet 2011, *Time-Domain Ab Initio Studies of Relaxation Dynamics of Photogenerated Charge Carriers In Quantum Dot Solar Cells*
2. Pr. Ricardo Tarroni, Università di Bologna, Italy, 14 juin - 14 juillet 2010, *Ab-initio Calculations of Rovibronic States*

### **Expertises :**

1. Expert pour l'Isite FUTURE, Université Paris-Est, novembre 2019
2. Expert pour le BQR 2019 de l'Université du Littoral Côte d'Opale, novembre 2018
3. Rapporteur pour : Research project carried out by an incoming researcher, co-financed with the Horizon 2020 framework program within the Marie Skłodowska-Curie cofund, Poland, avril 2016
4. Expert pour le LabEx Michem, Sorbonne Universités, février 2018
5. Expert pour le LabEx PALM, Campus Paris Saclay, janvier 2015, janvier 2016
6. Rapporteur pour l'ANR en 2012, deux fois en 2017, en 2019

### **Rapporteur dans des journaux internationaux à comité de lecture :**

Canadian Journal of Chemistry, Canadian Journal of Physics, Chemical Physics Letters, Crystals, Japanese Journal of Applied Physics, Journal of Chemical Physics, Journal of Molecular Spectroscopy, Journal of Molecular Structures, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfers, Journal of Theoretical and Computational Chemistry, JVST A: Journal of Vacuum Science and Technology, Molecular Physics, The European Physical Journal D, The Journal of Physical Chemistry, Theoretical Chemistry Accounts.

### **Co-Organisation d'événements :**

1. Sensors for environment: theoretical and experimental study, ESIEE, Paris, France, 5 December 2022.
2. Jtms2018 : Journées "Théorie, Modélisation et Simulation", Paris, France, 24-25 mai 2018, <http://jtms2018.sciencesconf.org/>
3. Jtms2017 : Journées "Théorie, Modélisation et Simulation", Paris, France, 1-2 juin 2017, <http://jtms2017.sciencesconf.org/>
4. MeMoSim2015 : Méthodes de modélisation et simulation multiéchelles, Lyon, France, 30 mars - 2 avril 2015, <http://memosim2015.sciencesconf.org/>
5. 14ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Paris, France, 30 juin - 4 juillet 2014, <http://rctf2014.sciencesconf.org/>.
6. 29èmes Journées de l'Innovation et de la Recherche dans l'Enseignement de la Chimie sur Enseigner une chimie économe et créatrice, Marne-la-Vallée, France, 21-24 mai 2013.
7. Third French Chinese Workshop in Theoretical Chemistry, La Colle-sur-Loup, France, October 10-12, 2011.
8. Ecole thématique du RFCT "Spectroscopie in silico", Dourdan, France, 7-11 novembre 2011.

### **Comités scientifiques :**

1. 16ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Toulouse, France, 8-12 octobre 2018, <http://rctf2018.sciencesconf.org/>
2. 15ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Lyon, France, 27 juin - 1 juillet 2016, <http://rctf2016.univ-lyon1.fr>
3. DynaMol 2016 : Dynamique moléculaire, de l'atomistique à l'échelle méso (Ecole thématique CNRS), Paris, France, 9-12 mai 2016
4. MeMoSim2015 : Méthodes de modélisation et simulation multi-échelles, Lyon, France, 30 mars - 2 avril 2015, <http://memosim2015.sciencesconf.org/>
5. 14ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Paris, France, 30 juin - 4 juillet 2014, <http://rctf2014.sciencesconf.org/>.
6. 13ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Marseille, juillet 2012.

### **Chairman de sessions :**

#### **Nationales :**

1. 16ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Toulouse, France, 8-12 octobre 2018, <http://rctf2018.sciencesconf.org/>
2. 15ème Rencontres des Chimistes Théoriciens Francophones, Lyon, France, 27 juin - 1 juillet 2016, <http://rctf2016.univ-lyon1.fr>

#### **Internationales :**

1. MOLIM Workshop on Intermolecular Interactions, Santiago de Compostela, Spain, October 2-4, 2017.
2. COST MOLIM working group 3 meeting, Bratislava, Slovakia, March 21-22, 2016.
3. *5<sup>th</sup> Chinese-French Workshop in Theoretical Chemistry*, Strasbourg, France, May 10-13, 2015.

### **Formation scientifique :**

1. Participation à l'école d'été "European Summerschool in Quantum Chemistry", Tjörnarp, Suède, août 2001
2. Participation à l'école d'hiver "Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry", Allemagne, Jülich, février 2000

### **Séjours de moyenne durée à l'étranger :**

1. Study of matrix spectra. Institute for Physical Chemistry, Basel Universitiät, Suisse, septembre 1999
2. Determination of the potential energy surface of  $N_4^+$  by DFT calculations and of the rovibrational levels of  $N_4^+$  by variational calculations. Sous la direction du Prof. N.C. Handy, Department of Chemistry, University of Cambridge, U.K., de janvier à février 1998

## Responsabilités administratives :

Directrice du laboratoire du laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle, MSME UMR 8208 CNRS (Tutelles : Univ Gustave Eiffel, Univ Paris-Est Créteil, CNRS), depuis janvier 2020.

**Pour la Comue Université Paris-Est (jusqu'en 2020) puis Paris-Est Sup (2020-) :**

- Membre du Conseil de l'Ecole Doctorale Sciences, Ingénierie et Environnement, **depuis janvier 2020**.
- Membre élu du conseil académique, d'avril 2016 à décembre 2019.

**Pour l'Université de Paris-Est Marne-la-Vallée (jusqu'en 2019) puis l'Université Gustave Eiffel (2020-) :**

### Présentes

- Membre élu du conseil académique, **depuis septembre 2016**.
- Membre de la commission recherche, **depuis mars 2021**.
- Membre du groupe de travail sur les charges administratives des enseignants-chercheurs, 2018-2019
- Membre de la commission CVEC, **depuis janvier 2019**.
- Membre de la commission d'exonération des droits d'inscription, **depuis septembre 2019**.
- Membre élu du conseil de L'Institut Francilien des Sciences Appliquées, **depuis novembre 2014**.
- Membre du directoire et du conseil du laboratoire MSME, **depuis septembre 2013**.
  
- Membre du comité d'audition du repyramidage MCF vers PU 60<sup>ème</sup> section, novembre 2022.
- Membre du comité de recrutement Ingénieur de recherche 1ère classe : Responsable du partenariat et de la valorisation de la recherche, juillet 2018
- Membre élu de la Commission permanente d'Établissement section 31, **depuis décembre 2012**.
  - Membre du comité de sélection du concours 31MCF-UGE en 2020.
  - Membre du comité de sélection du concours 31MCF-UPEM en 2018.
  - Membre du comité de sélection du concours de PRAG de Chimie en 2018.
  - Membre du comité de sélection du concours 31MCF-UPEM en 2016.
  - Membre du comité de sélection du concours 31Pr-UPEM en 2014.
  
- Membre du comité de sélection Parcousup pour la licence Physique Chimie (avant la licence de Sciences Physiques) et la licence Sciences pour l'Ingénieur, **depuis avril 2018**.
- Membre des conseils de perfectionnement du Master de Chimie et du Master de Mécanique, **depuis novembre 2020**, de la Licence de Physique de l'UPEC **depuis juin 2021**.

### Passées

- Membre élu de la CFVU, de septembre 2016 à décembre 2020.
- Membre du conseil de perfectionnement du Master de Chimie, de janvier 2017 à juin 2019.
- Directrice adjointe de L'Institut Francilien des Sciences Appliquées, d'avril 2012 à avril 2013.
- Responsable du Département de Formation et de Recherche "Sciences Physique, Chimique et Mécanique" de L'Institut Francilien des Sciences Appliquées, de décembre 2010 à avril 2013.
- Responsable de la première année du Master Sciences de la Matière, de septembre 2010 à avril 2012.
- Responsable de la première année du Master Physique et Chimie pour l'Ingénierie, de 2009 à 2010.
- Responsable de la première année du Master Physico-Chimie, Procédés et Énergie, de 2007 à 2009.
- Membre élu du conseil de l'U.F.R. Sciences de la matière, de mars 2006 à décembre 2010.
- Responsable de la spécialité Chimie Théorique du Master Physico-Chimie, Procédés et Énergie, de février 2006 à septembre 2008.

- Membre élu de la Commission permanente d'Établissement sections 30/31/32/33, de 2009 à 2010.
- Membre élu de la Commission de Spécialistes d'Établissement sections 30/31/32/33/62, de 2003 à 2008.
- Co-responsable de la Maîtrise Sciences Physiques, de 2002 à 2003.

**Membre de comités de sélection externes :**

- Poste de Maître de Conférences 33MCF200, Faculté des Sciences d'Orsay, Université Paris Saclay, 2021.
- Poste de Maître de Conférences 30MCF4451, Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique, Université de Reims Champagne-Ardenne, 2020.
- Poste de Professeur des Universités 31PR2098, Faculté des Sciences d'Orsay, l'Université Paris-Sud, 2019.
- Poste de Maître de Conférences 31MCF1062, Institut de Chimie Moléculaire de Reims, Université de Reims Champagne-Ardenne, 2018.
- Poste de Maître de Conférences 31MCF588, Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-Sud Orsay, 2016.
- Poste de Professeur des Universités 31PR0017-4344, Laboratoire PHENIX, Université Pierre et Marie Curie, 2016.
- Poste de Professeur des Universités 28-30PU4306-2230, Institut Lumière Matière, Université Claude Bernard Lyon 1, 2015.
- Poste de Professeur des Universités 31PR0225, équipe Chimie Théorique, Méthodologies, Modélisation de l'Institut Charles Gerhardt, Université de Montpellier, 2015.

**Pour le HCERES :**

- Membre du comité de visite du LCAR à Toulouse, novembre 2019.

**Pour le CNRS :**

- Membre nommé du comité national du CNRS pour la section 13, de septembre 2012 à juin 2016.
- Membre du comité de recrutement d'un MCF et d'un PR attachés à l'ENS pour 2014 pour des chercheurs CNRS section 13
- Expert pour l'HCERES : participation au comité de visite de l'IPREM à Pau, janvier 2015.
- Expert pour l'AERES : participation au comité de visite de l'IRDEP à Chatou, novembre 2012.
- Membre du jury d'admission pour le concours de chargé de recherche de l'Institut de Chimie du CNRS, juin 2010.

**Pour le Réseau Français de Chimie Théorique :**

- Directrice adjointe du GDR3333 du CNRS de 2014 à 2018.
- Coordinatrice nationale du Réseau Français de Chimie Théorique de juillet 2014 à janvier 2018. Participation au portage du renouvellement pour 2018-2022 (50 laboratoires).
- Trésorière du Réseau Français de Chimie Théorique, de 2010 à 2014.
- Co-responsable du label de Chimie Théorique pour le pôle Ile-de-France organisé par le RFCT (organisation et gestion de l'enseignement de Chimie Théorique sur le site francilien), de 2010 à 2014.

Trésorière de la sous-division « Simulation et Modélisation » de la division Chimie Physique de la SCF-SFP, de mai 2013 à décembre 2018.

## Enseignement :

### A l'Université de Marne-la-Vallée depuis 2001 :

Chimie Générale, Organique, Inorganique, Physique, Quantique, Théorique, Liaison, Informatique et Programmation.

Nombre d'heures d'enseignement (HeqTD)			
Année	1 <sup>er</sup> cycle/Licence	2 <sup>nd</sup> cycle/Master	Total
01/02 <sup>a</sup>	72	61	162
02/03	116	102	218
03/04	81	111	192
04/05	99,5	93,5	193
05/06	78	115	193
06/07 <sup>b</sup>	60	38	98
07/08	169	23	192
08/09	134	61	195
09/10	180	42	222
10/11	108,5	76	184,5
11/12	102,5	86,75	189,25
12/13	151	41,75	192,75
13/14 <sup>c</sup>	73	27,75	100,75
14/15	135	50,25	185,25
15/16	161,5	38,2	199,7
16/17	143,1	69,83	212,93
17/18	155,03	42,94	197,97
18/19	204,5	18,75	223,25
19/20 <sup>d</sup>	140,5	18,75	159,25
20/21 <sup>d</sup>	153	18,75	171,75
21/22 <sup>d</sup>	162,34	18,75	181,09
22/23 <sup>d</sup>	140	19,75	158,75

a. congé de maternité

b. CRCT de 6 mois à partir de mars 2007

c. Délégation CNRS de 6 mois

d. Décharge pour la direction du laboratoire MSME

### A l'Université de Cambridge, U.K., comme vacataire pour l'année 2000-2001 :

- Supervisions d'étudiants de deuxième année dans le cadre d'enseignements de Mécanique Quantique, de Symétrie et de Liaison chimique pour un volume total de 27 HTD.
- TP de Chimie Théorique : 20 HTD.
- Encadrement d'un étudiant de 3<sup>ème</sup> année lors d'un projet de recherche bibliographique sur les calculs variationnels dans les molécules de 3 et 4 atomes.

### Pour le label de Chimie Théorique dans le pôle Ile de France : cours à destination des étudiants de M2 et les doctorants en Chimie Théorique de l'Ile de France

- Cours et TP de détermination de surface d'énergie potentielle d'une molécule polyatomique, utilisée ensuite pour un calcul de dynamique des noyaux 3H/an, Paris, de janvier 2015 à janvier 2018
- TP de calculs électroniques, introduction à MOLPRO 3H/an, Paris, janvier 2011, 2012
- Etude théorique de la spectroscopie rovibrationnelle 3H/an, Paris, janvier 2010
- Etude théorique de la spectroscopie rovibrationnelle et des couplages entre moments angulaires 3H/an, Paris, janvier 2009
- Calculs ab initio et spectroscopie électronique appliqués à des molécules polyatomiques 3H/an, Paris, janvier 2008

### Ecoles d'été :

- Participation à l'atelier de "Chimie Quantique pour l'application en Spectroscopie IR de haute résolution et Dynamique Quantique de petites molécules" dans le cadre du GDR SPECMO, cours "Méthodes de Calculs ab initio", Strasbourg 2010

- Participation à l'école d'été thématique du CNRS : Mouvements de grande amplitude : Application à la spectroscopie moléculaire, cours intitulé "Surface d'énergie potentielle ab initio", Aussois 2009
- Participation à l'encadrement de TP de la 8ème Université d'été de Physico Chimie Théorique, Ambleteuse 2003

#### **Ecole doctorale Sciences, Ingénierie et Environnement (Paris-Est Sup) :**

- Developments of gas detection devices from quantum chemistry calculations (1h). Cours en anglais proposé par le LabEx MMCD, avril 2022.

#### **Fête de la science :**

- « L'effet de serre causé par le CO<sub>2</sub> » en collaboration avec M. Guitou et J.-M. Riou, octobre 2016 et 2017  
L'effet de serre causé par le CO<sub>2</sub> est démontré à travers une expérience simple. Deux bouteilles remplies à moitiés d'eau et bouchées sont exposées à une lampe IR. Dans l'une d'elle, du CO<sub>2</sub> a été formé par réaction entre du vinaigre et de l'hydrogénocarbonate de sodium. Les variations de température sont observées au cours du temps dans les deux bouteilles.
- « Les mouvements de molécules » en collaboration avec F. Le Quéré et M. Guitou, octobre 2011 et 2012  
Présentation d'animations java pour expliquer les mouvements microscopiques des molécules : mouvements brownien et translation, rotation et vibration, pour faire le liens avec la spectroscopie et les changements d'états

#### **Encadrements de projets d'étudiants de licence :**

L1 :

2022	Origines de la vie sur Terre
2020	Le marc de café : nouvel or brun des chimistes ?
2019	La décontamination des agents chimiques par les nanoparticules
2018	Les isotopes stables au service de la justice
2018	Les aléas physico-chimiques de la séquestration du CO <sub>2</sub>
2015	Les isotopes comme éléments d'ana

L2 :

2021	L'effet de serre : comparaison entre Mars, Venus et la Terre.
------	---

L3 :

2022	Analyse des couleurs émises par des molécules de colorant
2021	Structure cristalline des métaux