

CURRICULUM VITAE

Nom, Prénom CIOFINI, ILARIA
Lieu et date de naissance Arezzo, 22 août 1973
Situation de famille mariée ; 1 enfant (Anita, 21/04/2007)
e-mail ilaria-ciofini@chimie-paristech.fr

Situation professionnelle

Fonction actuelle Directeur de Recherche CNRS (DR2)
Lieu de travail LECIME, Laboratoire d'Electrochimie, Chimie des Interfaces et Modélisation pour l'Energie, CNRS UMR-7575, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – Chimie ParisTech,
Date d'entrée 1^{er} Octobre 2010

Formation

Lycée (1987-1992) Diplômée du Lycée Scientifique d'Etat F. Redi de Arezzo (Italie), avec la note de 59/60.
Université (1992-1997) 'Laurea in Chimica' (Master) pendant l'année universitaire 1996/97, à l'Université des Etudes de Florence (Italie) avec la note de 110/110 *cum laude*, en soutenant la thèse: "Metodi di calcolo per la descrizione delle interazioni magnetiche (*Méthodes de calcul pour la description des interactions magnétiques*)" (en italien), directeur de thèse le Prof. Alessandro Bencini. Co-directeur de thèse le Prof. Dante Gatteschi.
Doctorat de Recherche (Nov. 1997-Juin 2001) Doctorat de Recherche en Chimie pendant l'année 2001, à l'Université de Fribourg (Suisse), obtenue avec les félicitations du jury, en soutenant la thèse "*Theoretical study of magnetic interactions and of highly correlated molecular systems*" (en anglais), directeur de thèse le Prof. Claude A. Daul. Jury de thèse: Prof. A. Gossauer (Dep. de Chimie, Université de Fribourg, Suisse), Prof. D. Baeriswyl (Inst. de Physique Théorique, Université de Fribourg, Suisse) et Prof. J.-P. Malrieu (Université Paul Sabatier, Toulouse, France).
HDR (16 Nov. 2009) "Ab-initio modeling of photochemical and magnetic properties of molecular systems" Jury: Prof. Henry Chermette (Uni. Lyon), Prof. Christopher J. Cramer (Uni. Minnesota, rapporteur), Prof. Nathalie Guihery (Uni. Toulouse), Dr. Jean-François Halet (Uni. Rennes), Dr. Manuel Ruiz-Lopez (Uni Nancy, rapporteur), Dr. Philippe Sautet (ENS Lyon, rapporteur), Dr. Andreas Savin (Uni. Paris VI)

Parcours Professionnel

Post-Doc (2001- 2002) Post-doctorant dans le *GraduiertenKolleg Magnetische Resonanz*, Universität Stuttgart, Allemagne. Le travail est effectué principalement dans le groupe du Prof. Martin Kaupp (Institut für Anorganische Chemie, Universität Würzburg Am Hubland).

Chercheur Associé CNRS (2002- 2004) Chercheur associé CNRS (poste-rouge) dans le groupe du Prof. Carlo Adamo dans le Laboratoire d'ElectroChimie et Chimie Analytique de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris.

IR2 CNRS (Déc. 2004- Sept. 2010) Ingénieur de Recherche CNRS (IR2) dans le groupe du Prof. Carlo Adamo dans le Laboratoire d'ElectroChimie et Chimie Analytique de l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris.

Séjours invités

Chercheur Invité (Apr. 2005) Chercheur invité dans le groupe du Prof. V. Barone (Department of Chemistry of the University of Naples (Italy). Short Term Scientific Mission COST D26. Subject: "Prediction of spectroscopic parameters for molecular species in solution" .

Chercheur Invité (Apr. 2009-Jun. 2009) Chercheur invité à l' Institute for Mathematics and its Applications (IMA), (Minneapolis, EU) dans le cadre du IMA Thematic Year on Mathematics and Chemistry (Sep. 2008 – June 2009 program)

Écoles et Stages

École en Chimie Computationnelle organisée par l'Université de Perugia qui a eu lieu du 6-8 au 25-8-1997 à Perugia (Italie).

Décembre 1998

Stage dans le Centre Suisse pour le Calcul Scientifique (CSCS) dans le cadre d'un programme PRSS (Student Mobility Project Ed. 1998). Développement d'un programme Fortran90 pour le calcul des énergies des états de spin.

EXPERIENCE DIDACTIQUE

COURS

Semestre d'été 1997-2001 (Uni. Fribourg, CH)

Responsable des travaux dirigés en chimie computationnelle pour étudiants en 3eme année de licence en Chimie. Les TD sont effectués (chaque année) dans 10 sessions de 4 heures.

Semestre d'été 2000 (Uni. Fribourg, CH)

Responsable pour les travaux pratiques liés au cours "Density Functional Theory" donné par M. Prof. C. A. Daul.

2004/2005, 2005/2006, 2006/2007, 2007/2008, 2008/2009 (ENSCP, F)

Master de Recherche : responsable pour 8h de cours et 20h de TP dans le module « *Modélisation moléculaire* »

2008/2009 (ENSCP, F)

2^{ème} année : TD de Modélisation Moléculaire (8h)

ECOLES

- Centre Suisse pour le Calcul Scientifique (CSCS) Manno (Suisse) 27-31 juillet 1998

Assistante et responsable pour les TP.

- CILEA, Segrate, Milano (Italie) 24-28 juillet 2000.

Assistante et responsable pour les TP.

- Centre Suisse pour le Calcul Scientifique (CSCS): Séminaire hors-ville du 3ème cycle en Chimie Physique 2004, Manno (Suisse) 19-24 Septembre 2004

Assistante et responsable pour les TP.

- International School for Advanced Studies (SISSA) Trieste (Italie) 4-7 Mars 2006

Intervenant Formation PhDs.

-Institut National de l'environnement industriel et des Risques (INERIS) Verneuil-en-Halatte (France) 30 Janvier- 1 Février 2007

Intervenant Formation et TP.

FORMATIONS et ECOLES CNRS

- Formation CNRS « Modélisation en Chimie : Techniques de dynamique moléculaire en phase condensée » E.N.S.C.P., Paris (France) 6-10 Juin 2005

Membre du comité local et responsable pour les TP.

- Formation CNRS « Modélisation Moléculaire – Module Initiation » Université de Rennes, Rennes (France) 17-19 Octobre 2005

Intervenant (5h30 de cours sur 20h totales).

- Formation CNRS « Modélisation des propriétés chimico-physiques de molécules : maîtrise de l'outil quantique » ENC Montpellier (France) 26-30 Juin 2006

Intervenant

- Ecole Thématique CNRS « Modélisation des propriétés chimico-physiques de molécules : maîtrise de l'outil quantique » ENC Montpellier (France) 2-6 Juin 2008

Intervenant

ACTIVITES D'ENCADREMENT : STAGES

Université de Fribourg (CH)

Novembre - Décembre 1999:

Thomas Bark: Travail d'Avancé en Chimie Inorganique.

Force Field Modelling of Silver-Oligopyridine Complexes

Décembre 1999-Janvier 2000:

Laurence Jungo: Travail d'Avancé en Chimie Inorganique.

Ab-initio determination of the stretching and bending constants for the Ru(pyridine)₆²⁺ and their application to determine the relative energies of Λ and Δ Ru(bpy45)₃²⁺ with HyperChem.

Mars – Avril 2001

Mehdi Bounouar: Travail d'avancé en Chimie Inorganique

Structure de l'état de transition formé durant la réaction d'échange d'eau du complexe hexa-aquo de Vanadium(II)

Avril - Mai 2001

Valéry Weber: Travail de Diplôme en Chimie Inorganique

Calculs de propriétés atomiques à l'aide de la DMRG

Mai - Juin 2001

Mehdi Bounouar: Travail de Diplôme en Chimie Inorganique

Modélisation des propriétés ferromagnétiques du BiCrO₃ (Perovskite)

ENSCP (France)

Février- Juin 2004

Frédéric Labat. Stage de DEA (en codirection avec le Prof. Adamo)

Modélisation des procédés d'hydrogénation asymétrique

Février- Juin 2005

Nathalie Bouet. Stage de Master (en codirection avec le Prof. Adamo)

Etude ab-initio (DFT) des propriétés électroniques d'une diade inorganique photosensibilisateur-accepteur

Février- Juin 2006

Marta Zamboni. Stage de Master (en codirection avec le Prof. Adamo)

Etude ab-initio du couplage magnétique de systèmes magnétiques π conjugués à l'état fondamental et excité : vers une modélisation des processus photomagnétiques

Septembre – Décembre 2006

Aurelien Moncomble. Stage Master 1^{ère} année (encadrement technique)

Etude ab-initio DFT et TD-DFT de l'état fondamental et excité du phenyl-butadiene

Février- Juin 2008

Tangui Le Bahers. Stage de Master (en codirection avec le Prof. Adamo)

Etude ab initio des propriétés luminescentes du tris-(acide 8-hydroxyquinoline-5-sulfonique)-aluminium (III) par TD-DFT

Février- Juin 2010

Diane Pilard. Stage de Master

Magnetic interaction in photoswitchable molecules: a DFT study

ACTIVITES D'ENCADREMENT : THESES**Octobre 2007 –Décembre 2010**

Cyril Peltier. Thèse de Doctorat (Bourse Ministère en codirection avec le Prof. C. Adamo)

Etude théorique des dispositifs moléculaires photo-magnétiques pour la spintronique supramoléculaire

Octobre 2008 –

Tangui Le Bahers .Thèse de Doctorat (Bourse Ministère en codirection avec le Dr. Thierry Pauporté)

Vers l'optimisation des cellules solaires à colorant à base de ZnO mésoporeux : une approche théorique et expérimentale

PARTICIPATION A DES JURYS

- Membre du jury de thèse de M. B. Xerri, directrice Dr. D. Berthomieu (Montpellier 11/12/2007)
- Membre du jury de thèse de Mme M. Poor Kalhor, directeur Prof. H. Chermette (Lyon 17/12/2009)
- Membre du jury de master de M. C. Hercend (Paris, 25/6/2008)
- Membre du jury pour le concours d'Ingénieur de Recherche (IGR 2C "chef de projet ou expert en calcul scientifique") Université de Marne la Valle (11/07/2008)

CONTRATS*Nationaux*

- ANR blanc (non thématique) The behavior of water in heterogeneous confined environments (Hétéro-eau); porteur A. Fuchs (2006-2008).
- ANR blanc (non thématique) Nexus States for Molecular Spintronics : a joint theoretical and experimental study (NEXUS); porteur C. Adamo (2007-2009).
- ANR Thématique Programme « Habitat intelligent et solaire photovoltaïque », Asyscol projet ; porteur D. Bellet (2008-2011).
- ANR blanc Edt 2010 NUMA « Nouvelles frontières de la chimie de l'uranium » porteur M. Mazzanti (2010-2013)
- ANR blanc Edt 2010 DinFDFT « Développement et Implémentation de Nouvelles Fonctionnelles d'Echange et Corrélation en Théorie de la Fonctionnelle de la Densité» porteur P. Cortona (2010-2013)
- ANR Thématique Programme Chimie Durable-Industrie-Innovation- Edt 2010 PREDIMOL «PREDIction des propriétés physico-chimiques des produits par modélisation MOLéculaire », porteur P. Rotureau (2010-2013)

Européens

- COST Novel embedding methodologies for quantum chemistry: development and applications to molecular sciences Action D26 n. D26/0001/02, porteur C. Daul (2002-2006)
- COST Development of Density Functional Theory models for an accurate description of electronic properties of materials possessing potential high non-linear optical properties, Action D26 n.D26/0013/02, porteur H. Chermette (2003-2006)

Bilatéraux

- EGIDE-PAI RILA Modélisation quantique des propriétés spectroscopiques de molécules adsorbées sur des surfaces (France-Bulgarie) porteurs C. Adamo et T. Mineva (2005-2006)
- EGIDE-PAI German de Stael Dispositifs moléculaires photo-magnétiques (PMMD), vers une spintronique supramoléculaire (France-Suisse) porteurs P. Lainé et C. Daul (2006-2007)
- EGIDE-PAI Tournesol Etude ab initio de la fluorescence de molécules organiques d'intérêt industriel (France-Belgique) porteurs C. Adamo et D. Jacquemin (2007-2008)

ORGANISATION D'ATELIERS OU DE CONFERENCES INTERNATIONAUX

- Membre du Comité d'Organisation du workshop COST/ESF « Molecular Dynamics: Fundamentals and Recent Developments » (19-21 Novembre 2004, ENSCP-Paris).
- Membre du Comité d'Organisation de la «13eme conférence internationale sur les applications de la théorie de la fonctionnelle de la densité en chimie et en physique (DFT2009) » (31 Aout-4 Septembre 2009, Lyon).

ACTIVITE D'EDITEUR INVITE (GUEST EDITOR)

- Editeur Invité (Guest Editor) du numéro spécial de THEOCHEM réalisé suite à la «13eme conférence internationale sur les applications de la théorie de la fonctionnelle de la densité en chimie et en physique (DFT2009) »

ACTIVITE D'EXPERTISE

- Evalueur pour l'Agence Nationale pour la Recherche (ANR-France edt. 2005 et 2006).
- Reviewer pour : J. Am. Chem. Soc., J. Phys. Chem. A/C, J. Chem. Phys., PCCP, Theochem, Theor. Chem. Acc., Int. J. Quantum Chem., Chem. Phys. Lett., Mol. Sim., Coord. Chem. Rev., J. Chem. Theo. Comp., European Polymer Journal. Eur. J. Inorg. Chem.

GESTION

- Responsable pour les stations de travail (16) et clusters (154 cores) du groupe de Modélisation des Systèmes Complexes.

PRIX

Prix Vigener 2001 pour le meilleur travail de doctorat de la Faculté de Science de l'Université de Fribourg (CH).

Prix pour le meilleur poster (motivation: Best scientific content) dans le congrès *6th Congress of the World Association of Theoretically Oriented Chemists (WATOC02)*. Lugano (Suisse) 6-9.08.2002.

SEMINAIRES INVITÉS

- 1) *Magnetismo Molecolare*, Istituto di Chimica Quantistica ed Energetica Molecolare, Pisa (Italie) 15-2-1999
- 2) *Molecular Magnetism*, Departamento de Ciencias de la Tierra y Fisica de la Materia Condensada (CITIMAC), Université de Santander (Espagne) 22-2-2000
- 3) *Modeling Molecular Magnetism*, Department of Chemistry and Biochemistry, University of Bern (Suisse) 11-5-2000.
- 4) *Computing Magnetic Properties using DFT*, Ecole Normale Supérieure de Lyon (France) 12-10-2001.
- 5) *Modelling of magnetic properties using DFT: g-tensor of $\mu\text{-L}[\text{Re}(\text{CO})_3\text{Cl}]_2$* , Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (France) 04-02-2002
- 6) *Introduction to DFT methods for the computation of EPR and NMR parameters*. Institut de Chimie Physique, Université de Stuttgart (Allemagne) 10-09-2002

- 7) *Modelling of photochemical properties using DFT* Department of Chemistry, University of Fribourg (Suisse) 09-12-2004
- 8) *Modelling of Inorganic Dyads For Intramolecular Photoinduced E-T.* Department of Chemistry, University of Naples (Italie) 19-04-2005
- 9) *Density Functional Theory for the modelling of molecular magnetic properties.* Facultad de Quimica, Pontificia Universidad Catolica de Chile, Santiago (Chile) 25-11-2005
- 10) *Density Functional Theory for the modelling of molecular magnetic properties.* University of Zurich (Switzerland) 25-01-2006
- 11) *Applicazione di metodi di calcolo ab-initio per lo studio del comportamento fotomagnetico di sistemi molecolari.* Università di Palermo (Italie) 22-03-2006
- 12) *Applications des méthodes ab-initio pour l'étude du comportement photomagnétique de systèmes moléculaires complexes.* Université de Montpellier (France) 23-06-2006
- 13) *Intramolecular Spin Alignment. Spin Interactions in π -Conjugated Open-Shell Photoactive Organic Molecules: a DFT Study.* Université de Fribourg (Suisse) 14-11-2006
- 14) *Intramolecular spin alignment in photo-magnetic molecular devices.* CEA Grenoble (France) 13-11-2008.
- 15) *Molecular Spintronics using DFT.* Don Truhlar's group University of Minnesota, Minneapolis (USA) 20-04-2009
- 16) *Modeling magnetic and excited state properties using DFT.* Laboratoire de Chimie et Physique Quantique, Toulouse (France) 28-01-2010

PRODUCTION SCIENTIFIQUE

Publications dans des journaux internationaux avec comité de lecture: **82**

Publications soumises: **4**

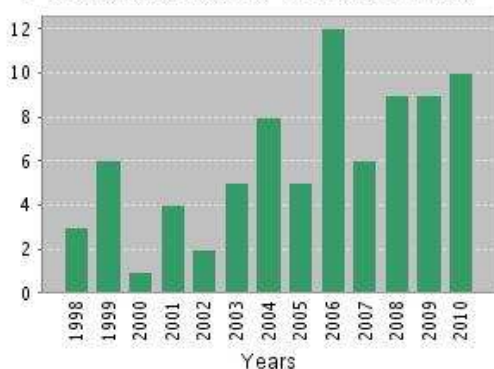
Chapitres dans des ouvrages: **5**

h-index: 24

Total Citing Articles : 1559 ***without self-citations: 1106***

(Source Isi Web of Knowledge, 1/10/2010)

Published Items in Each Year



Citations in Each Year

