



MEMBRE DU COLLÈGE DU HCÉRES

GILBERTE CHAMBAUD

Professeur des Universités Emérite

Université Paris-Est Marne la Vallée, Laboratoire MSME

Diplômée en chimie et sciences physiques de l'École Normale Supérieure de Fontenay aux Roses, Gilberte Chambaud intègre en 1972, intègre le personnel académique du Département de Chimie de l'École Normale Supérieure à Paris. Elle a soutenu sa thèse de doctorat en sciences à l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6) en 1980. Elle a été promue professeure titulaire à l'École Normale Supérieure de Paris en 1987. Elle a été professeure invitée pour un an (1991) à l'Université de Frankfurt-am-Main (Allemagne). Elle a ensuite rejoint l'Université de Marne-la-Vallée en 1992 en tant que professeur de chimie. Elle a été présidente du conseil d'administration de cette université (2001-2005).

Elle a été directrice adjointe du département de chimie MSTP4 du ministère de la Recherche et de l'Éducation en 2003-2005. De janvier 2006 à mai 2011, elle a été directrice scientifique de l'Institut de chimie du CNRS (Paris). De 2011 à 2014, elle a été déléguée scientifique à l'AERES (Agence nationale française d'évaluation de la recherche et de la formation), chargée de la coordination de l'évaluation des laboratoires universitaires de chimie en France. Elle a été nommée en 2015 au Conseil de la nouvelle Agence française d'évaluation (HCERES) et au Conseil d'Administration du CNRS. En 2018, elle a été élue présidente de la fondation de la nouvelle université Lille Nord Europe, à Lille.

Ses activités de recherche concernent pour l'essentiel la chimie physique moléculaire théorique. Elle a proposé des prévisions fiables en termes de réactivité, de stabilité et d'identification d'espèces moléculaires intermédiaires, de détermination structurale des systèmes moléculaires et de caractérisation spectroscopique précise. Ses principaux résultats concernent la détermination des structures et propriétés électroniques, à l'aide de méthodes électroniques fortement corrélées, et la détermination des spectres de rotation, allant parfois au-delà de l'approximation de Born-Oppenheimer et impliquant les couplages de moments cinétiques (électronique, vibration, rotation, spin-électron). Elle a contribué au développement de codes pour la spectroscopie rovibrationnelle (détermination des niveaux d'énergie et des intensités de transition) impliquant toute la dimensionnalité des couplages de moments cinétiques. Une grande partie de son activité porte également sur la structure et la spectroscopie de composés métalliques (MX, MX₂) et elle a pu déterminer, pour la première fois, l'interaction de physisorption de couches successives de molécules H₂ sur des surfaces métalliques. Elle est actuellement impliquée dans des réactions catalytiques sur des surfaces complexes. À partir de 2008, elle s'est intéressée aux modèles multi-échelles des propriétés mécaniques et piézoélectriques de nanofils de semi-conducteurs et de leurs propriétés multi-échelles.

Elle a supervisé 17 thèses de doctorats et a écrit plus de 145 publications dans des revues internationales ainsi que 150 actes de conférences et a été invitée à donner plus de 75 conférences nationales et internationales. Elle est auteur ou co-auteur de 8 manuels de physico-chimie. Elle a organisé 6 conférences internationales. Elle a été coordinatrice du réseau européen de laboratoires de chimie théorique (THEOCHEM II) en 2000-2003, A la Société Chimique de France, elle a été présidente de la division éducation en 2000-2004, dans le même temps elle était membre du réseau européen «*Tuning Project*» pour l'harmonisation européenne des formations universitaires de niveau Bachelor et Master. Elle a créé en 2006 le réseau français de chimie théorique et a lancé en 2008 le réseau franco-chinois de chimie théorique. Elle a été administratrice de l'Union des industries chimiques (UIC) et du synchrotron SOLEIL.

Elle a été distinguée par la Légion d'Honneur française en 2007 et elle est Officier des Palmes académiques depuis 2012. Elle est actuellement présidente de la Société Chimique de France (2015-2018). Elle est membre de l'Academia Europaea depuis 2016.

Autres responsabilités exercées

- Présidente de la Société Chimique de France (2015-2018)
- Présidente du Conseil d'Administration de la Fondation I-Site ULNE (Lille Nord Europe)

Missions d'évaluation réalisées

- Missions d'Evaluation au sein de l'AERES (2011-2014)
- Evaluation du FONDECYT (Chili) Novembre 2012
- Evaluation du programme Erasmus Mundus TCCM à la KU Leuven (2016)

Principales publications

- **CHAMBAUD G; MILLIE Ph; LEVY B;** Ab initio Hartree fock Instabilities in closed-shell molecular systems. THEORETICA CHIMICA ACTA Volume: 48 Issue: 2, 103-118 (1978).
- **CARTER S; HANDY N.C; CHAMBAUD G.; ROSMUS P.,** A variational method for the calculation of spin rovibronic levels of Renner-Teller triatomic molecules. MOLECULAR PHYSICS, Volume: 71 Issue: 3, 605-622 (1990)
- **SPIELFIEDEL A; FEAUTRIER N; GABRIEL W; CHAMBAUD G; ROSMUS P; BOTSCHWINA P,** Bent-Valence excited states of CO₂ JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS Volume: 97 Issue: 11, 8382-8388 (1992)
- **MITRUSHCHENKOV A; LINGUERRI R; CHAMBAUD G;** Piezoelectric properties of AlN, ZnO and HgZnO nanowires by first principles calculations. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, Volume : 113 Issue: 17, 6883-6886 (2009).
- **YVONNET J; MITRUSHCHENKOV A; CHAMBAUD G; HE Q.-C.;** Finite element model of nanowires with size-dependent mechanical properties determined by ab-initio calculations. COMPUTER METHODS IN APPLIED MECHANICS AND ENGINEERING Volume: 200 Issue: 5-8, 614-625 (2011)
- **GOELTL F; HOURIEZ C; GUITOU M; CHAMBAUD G; SAUTET Ph ,** Importance of a non-local description of electron-electron interactions in modeling the dissociative adsorption of H₂ on Cu(100). JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, Volume: 118 Issue: 10, 5374-5382 (2014)
- **D. Khiri, M Hochlaf, George Maroulis, Gilberte Chambaud.** SPIN-ORBIT EFFECTS IN THE SPECTROSCOPY OF THE X²Π AND ⁴Σ⁻ ELECTRONIC STATES OF CARBON IODIDE CI. *Journal of Physical Chemistry A*, 2018.
- **Xin Liu, Hongdan Zhu, Roberto Linguerra, Yu Han, Gilberte Chambaud, et al..** Interfacial-Bonding-Regulated CO Oxidation over Pt Atoms Immobilized on Gas-Exfoliated Hexagonal Boron Nitride. *ChemistrySelect*, 2017, 2, pp.9412-9419.
- **Khiri Dorra, Hager Grilli, Kirk A. Peterson, Gilberte Chambaud.** Are there stable excited triplet states of NCS-/CNS- and NCO-/CNO-?. *Molecular Physics*, Taylor & Francis, 2015, 113 (13-14), pp.1534.
- **M.T. Hoang, Julien Yvonnef, Alexander Mitrushchenkov, Gilberte Chambaud, H.L. Duan.** Size-dependent mechanical properties of axial and radial mixed AlN/GaN nanostructures. *Nanotechnology*, Institute of Physics, 2015, 26, pp.115703.
- **M. Prakash, K. Mathivon, David M. Benoit, Gilberte Chambaud, M. Hochlaf.** Carbon dioxide interaction with isolated imidazole or attached on gold clusters and surface: competition between r H-bond and p stacking interaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Royal Society of Chemistry, 2014, 16, pp.12503.