

**Parte A. DATOS PERSONALES****Fecha del CVA**

12/07/2019

Nombre y apellidos	M. Carmen JIMÉNEZ CALZADO		
DNI/NIE/pasaporte	80137847M	Edad	48
Núm. identificación del investigador	Researcher ID	<a href="#">D-1159-2011</a>	
	Código Orcid	0000-0003-3841-7330	

**A.1. Situación profesional actual**

Organismo	Universidad de Sevilla		
Dpto./Centro	Departamento de Química Física		
Dirección	Calle Profesor García González, s/n 41012 Sevilla		
Teléfono	954556210	correo electrónico	<a href="mailto:calzado@us.es">calzado@us.es</a>
Categoría profesional	Profesora Titular Universidad	Fecha inicio	21/11/2007
Espec. cód. UNESCO	221000,230700		
Palabras clave	Química teórica y computacional. Magnetismo molecular. Transferencia electrónica. Estructura electrónica. Métodos variacionales y perturbativos. Hamiltonianos Efectivos. Simulación propiedades magnéticas y validación modelos de spin.		

**A.2. Formación académica (título, institución, fecha)**

Licenciatura/Grado/Doctorado	Universidad	Año
Licenciatura en Química	Facultad de Química Universidad de Sevilla	Junio 1993
Tesina de Grado en Química	Departamento de Química Física Universidad de Sevilla	Marzo 1995
Doctorado en Química con acreditación de Doctorado Europeo	Departamento de Química Física Universidad de Sevilla	Mayo 1998

**A.3. Indicadores generales de calidad de la producción científica (véanse instrucciones)**

- Sexenios de investigación: 4 (1/1/1994 – 31/12/1999; 1/1/2000 – 31/12/2005; 1/1/2006-31/12/2011; 1/1/2012-31/12/2017)
- Tesis Doctorales Dirigidas: 1 (Jhon Enrique Zapata Rivera ) Codirección con Prof. Caballol. U.Rovira i Virgili. Apto Cum Laude con Mención Europea. Actualmente Profesor Titular en la Universidad de la Costa (Barranquilla, Colombia).
- Número de publicaciones: 80, de las cuales 55 en Q1, 42 como autor correspondiente, 28 resultantes de proyectos donde es IP.
- Índice de impacto promedio de revistas donde se ha publicado en últimos cinco años: 7.32 (1 Dalton Trans, 1 Chem Rev, 5 Inorg Chem, 1 JPCA, 1 Chem. Mater, 4 Chem Eur. J, 2 PCCP, 1JCC, 2 New J Chem)
- Citas totales: 2380 (Web of Science)
- Promedio de citas anuales durante los últimos cinco años: 172 citas (2014-2018)
- Índice h: 27

**Parte B. RESUMEN LIBRE DEL CURRÍCULUM**

- Natural de Palma del Río (Córdoba), 22/12/1970. Casada. Dos hijos.
- Especializada en el tratamiento teórico de sistemas magnéticos moleculares y extendidos y sistemas de valencia mixta, mediante métodos basados en la función de onda (CASSCF, CASPT2, NEVPT2, DDCI), y en el funcional de la densidad (DFT). Amplia experiencia en la evaluación de acoplamientos magnéticos y electrónicos, así como otros parámetros de interacción local, a través de hamiltonianos efectivos, y la racionalización de la naturaleza y amplitud de estas interacciones mediante el análisis de la función de onda y su lectura en base localizada. Amplia variedad de sistemas abordados: orgánicos, inorgánicos e híbridos, moléculas y sólidos cristalinos. Interesada en las transiciones de spin, fotomagnetismo, mecanismos de transición óptica y térmicamente inducidos. Particular interés

en la simulación de las propiedades macroscópicas de sistemas magnéticos polinucleares y en la validación de modelos de spin. Involucrada en el desarrollo y aplicación de diversas estrategias computacionales para el tratamiento teórico de sistemas de gran tamaño mediante métodos basados en la función de onda (orbitales localizados, dedicados, técnicas de truncación de espacio de IC,...)

- Adscrita al Dpto. Química Física de la U. Sevilla, donde es Prof. Titular desde Nov. 2007, ha llevado a cabo estancias en distintos laboratorios nacionales y europeos (Tarragona, Toulouse, Cosenza, Ferrara, Bologna, Rennes), estancia Postdoctoral en el Laboratoire de Physique et Chimie Quantiques (U. Paul Sabatier, Toulouse) bajo la supervisión de Prof. J.P. Malrieu, y financiada a través de contrato en proyecto Europeo y beca postdoctoral individual Marie Curie.
- Mantiene colaboraciones, en algunos casos activas durante más de 15 años, con otros grupos europeos interesados en los sistemas magnéticos y en su tratamiento teórico tales como los grupos de Prof. Caballol, Dr. De Graaf (U. Rovira i Virgili), (Prof. Illas, Dr. Moreira (Barcelona), Profs. Malrieu, Evangelisti y Maynau (Toulouse), Dr. Angeli, Dra. Ferretti (Ferrara), Prof. Champagne (Namur), Prof. Robert (Strasbourg), Prof. Ozarowski (Florida) y Dr. Jung (Los Alamos).
- IP en tres proyectos del Plan Nacional (CTQ2008-06644-C02-02, CTQ2009-07767, CTQ2015-69019-P), colaboradora en proyectos nacionales (5) y europeos (6). Participación continuada en congresos y workshops, mediante conferencias invitadas, comunicaciones orales y posters. Participación frecuente en la evaluación de tesis doctorales en España (6) y Europa (15), como miembro del tribunal y evaluadora externa.

## Parte C. MÉRITOS MÁS RELEVANTES (ordenados por tipología)

### C.1. Publicaciones

- Light-induced spin transitions in copper-nitroxide-based switchable molecular magnets: insights from periodic DFT+U calculations. R. Sánchez-de-Armas, N.C. Hernández, **C.J. Calzado\***, Chem. Eur. J. 24, 18988, 2018. Q1. 1 cita
- Electronic structure and magnetic interactions in the radical salt [BEDT-TTF]<sub>2</sub>[CuCl<sub>4</sub>], **C.J. Calzado\***, B. Rodríguez-García, J.R. Galán-Mascarós, N.C. Hernández, Inorg. Chem. 57, 7077-7089 (2018). Q1. 2 citas
- Evaluation of the Giant Ferromagnetic  $\pi$ -d Interaction in Iron-Phthalocyanine Molecule, R. Sánchez-de-Armas, **C.J. Calzado\***, J. Phys. Chem. A. 122, 1678-1690 (2018). Q2. 2 citas
- Evaluation of the Magnetic Interactions in Salts Containing [Ni(dmit)<sub>2</sub>]<sup>-</sup> Radical Anions. J. Zapata-Rivera, D. Maynau, **C. J. Calzado\***, Chem. Mater. 29, 4317 (2017). Q1. 3 citas.
- Analysis of the magnetic exchange interactions in Yttrium (III) complexes containing nitronyl nitroxide radicals. J. Jung, M. Puget, O. Cador, K. Bernot\*, **C.J. Calzado\***, B. Le Guennic\*, Inorg. Chem. 56, 6788-6801 (2017). Q1. 13 citas.
- Metal-Metal Interactions in Trinuclear Copper(II) Complexes [Cu<sub>3</sub>(RCOO)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>TEA)<sub>2</sub>] and Binuclear [Cu<sub>2</sub>(RCOO)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>TEA)<sub>2</sub>]. Syntheses and Combined Structural, Magnetic, High-Field Electron Paramagnetic Resonance, and Theoretical Studies. A. Ozarowski\*, **C. J. Calzado\***, R.P. Sharma, S. Kumar, J. Jezierska, C. Angeli, F. Spizzo, V. Ferrett\*. Inorg. Chem. 54, 11916 (2015). Q1. 37 citas.
- Mechanism of Magnetostructural Transitions in Copper-Nitroxide-Based Switchable Molecular Magnets: Insights from ab Initio Quantum Chemistry Calculations. J. Jung, B. Le Guennic, M. V. Fedin, V.I. Ovcharenko, **C.J. Calzado\***, Inorg. Chem. 54, 6891 (2015). Q1. 9 citas
- Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians. J. P. Malrieu, R. Caballol, **C. J. Calzado**, C. de Graaf, N. Guihery\*, Chem. Rev. 114, 429-492 (2014). Q1. 163 citas. Highly cited paper.
- On the Controversial Fitting of Susceptibility Curves of Ferromagnetic CuII Cubanes: Insights from Theoretical Calculations. Very Important Paper (VIP). **C.J. Calzado\***, Chem. Eur. J. 19, 1254-1261 (2013). Q1. 26 citas.
- The role of the magnetic orbitals in the calculation of the magnetic coupling constants from multireference perturbation theory methods, C. Angeli\*, **C.J. Calzado**, J. Chem. Phys. 137, 034104 (2012). Q1. 33 citas.



- Analysis of the magnetic coupling in binuclear systems. III. The role of the LMCT revisited, **C. J. Calzado\***, C. Angeli, D. Taratiel, R. Caballol, J.P. Malrieu, J. Chem. Phys. 131, 044327 (2009). Q1. 77 citas.

## C.2. Proyectos

**Referencia del proyecto:** PGC2018-101689-B-I00

**Título:** DISPOSITIVOS MOLECULARES DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LA QUÍMICA CUÁNTICA

**Investigador principal:** Carmen Jiménez Calzado **Entidad financiadora:** Ministerio Ciencia, Innovación y Univ.. **Duración:** 01/01/2019- 31/12/2021. **Financiación recibida (en euros):** 45980

**Referencia del proyecto:** CTQ2009-07767

**Título:** Modelización ab initio de materiales magnéticos polinucleares: evaluación de interacciones locales y simulación de propiedades colectivas

**Investigador principal:** Carmen Jiménez Calzado **Entidad financiadora:** MICINN. **Duración:** 01/01/2010 - 31/12/2013 **Financiación recibida (en euros):** 25000

**Referencia del proyecto:** CTQ2008-06644-C02-02/BQU

**Título:** Estrategias para el estudio teórico de materiales moleculares polinucleares y sus propiedades eléctricas y magnéticas.

**Investigador principal:** Carmen Jiménez Calzado **Entidad financiadora:** MICINN. **Duración:** 01/01/2009- 31/12/2009 **Financiación recibida (en euros):** 10890

**Referencia del proyecto:** SB2009-0184

**Título:** Modelizando sistemas magnéticos: de modelos de referencia a sistemas de gran tamaño

**Investigador responsable:** Carmen Jiménez Calzado

**Solicitante:** Dr. Antonio Monari **Entidad financiadora:** Ministerio de Educación – Estancias Jóvenes Doctores en España **Duración:** 1/5/2010-31/10/2011

**Referencia del proyecto:** COST Action D26 en Química

**Título:** Theoretical understanding and prediction of magnetic properties in molecules and solids

**Investigador principal:** F. Illas (U. Barcelona)

**Entidad financiadora:** Comisión Europea, DG12. **Duración:** 2002-2006

**Referencia del proyecto:** MOLMAGRES

**Título:** Establishment of an international research group for the study and characterization of molecular magnets

**Investigador principal:** Celestino Angeli (U. Ferrara). **Entidad financiadora:** U. Ferrara (Italia).

**Duración:** 01/12/2013-30/11/2014 **Financiación recibida (en euros):** 6750

## C.5. Estancias en centros extranjeros

- Dipartimento di Chimica de la Università della Calabria. Cosenza (Italia). 1995. Estancia predoctoral 7 semanas. Ayudas para Estancias Breves en el Extranjero de becarios de FPI Convocatorias 1995.
- Laboratoire de Physique Quantique. Université Paul Sabatier. Toulouse (Francia)
  - 1996/97. Estancia predoctoral 10 semanas. Ayudas para Estancias Breves en el Extranjero de becarios de FPI Convocatorias 1996.
  - 1999. Estancia postdoctoral 24 semanas. Beca TMR en el proyecto Quantum Chemistry of Excited States (QUCEX). ERB-FMRX-CT96-0079.
  - 2000/01. Estancia postdoctoral 21 meses. Beca postdoctoral individual Marie Curie, HPMF-CT 1999-00285.
- CINECA. Università di Bologna & U. Ferrara (Italia). 2002. Estancia postdoctoral 3 semanas. Proyecto MINOS, auspiciado por el programa 'Human Potential and Mobility' de la Comisión Europea.



- Dipartimento di Science Chimiche e Farmaceutiche. Università Degli Studi di Ferrara. Italia. 1 semana. Oct. 2014. Docente en Doctorado en Ciencias Químicas.
- Institut de Sciences Chimiques de Rennes. Université de Rennes. Prof. Invitada. 1 semana. Nov. 2014.
- Universidad de la Costa. Barranquilla (Colombia). 1 semana. Septiembre 2018.

### **C.6. Contribuciones a congresos**

**Comunicaciones orales y conferencias en congresos: 27**

**Presentación de posters: 28**

**Organización de congresos:**

**Miembro del comité organizador** de International Conference on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2002. Sevilla. 10-13 Sept 2002.

**Organizadora** de European Workshop on Molecular Magnetism (Jujols VI). Sevilla. 1-3 Febrero 2012.

### **C.7. Participación en comités**

Miembro de tribunal y evaluadora de tesis doctorales:

- 2005. J. M. Junquera, U. Valencia (dir. J.Sanchez-Marin). Tribunal
- 2006. E. Rodriguez Balada, U. Rovira i Virgili (dir. M. Reguero, R. Caballol). Tribunal
- 2010. N. Quiralt, U. Rovira i Virgili (dir. R. Caballol, C. de Graaf). Tribunal
- 2010. J.B. Rota, Ecole Normale de Lyon (dir. V. Robert). Evaluadora y miembro tribunal
- 2013.S. Cardona, IcMol Valencia (dir. E. Coronado, J.M. Clemente-Juan, A. Gaita-Ariño). Evaluadora
- 2013. A.B. Pradipto, U. Groningen (dir. R. Broer). Evaluadora
- 2014.T. Krah, U. Strasbourg (dir. V. Robert, N. Ben Amor). Evaluadora y miembro tribunal
- 2015.M.El Khatib, U.Toulouse (dir.S.Evangelisti,T.Leininger).Evaluadora y tribunal
- 2015. J.Jung, U. Rennes (dir. B.Le Guennic). Evaluadora y miembro del tribunal
- 2017. L. Tenti, U. Ferrara, Italia (dir. C. Angeli). Evaluadora y miembro del tribunal
- 2017. F. Tosi, U. Ferrara, Italia (dir. V. Bandrolini). Miembro del tribunal
- 2017. A. Bino, U.Ferrara Italia (dir. S. Manfredini). Miembro del tribunal
- 2017.D. Cristofaro, U.Ferrara, Italia (dir. S. Benetti). Miembro del tribunal
- 2017. I. Rugiero, U.Ferrara, Italia (dir. A.Medici). Miembro del tribunal
- 2017. L. Casarin, U.Ferrara, Italia (dir. C.A. Bignozzi). Miembro del tribunal
- 2017. R. Guzzinati, U.Ferrara, Italia (dir. A. Cavazzini). Miembro del tribunal
- 2017. F. Prencipe, U.Ferrara, Italia (dir. P.G. Baraldi). Miembro del tribunal
- 2017. A. Zaghi, U.Ferrara, Italia (dir. C.di Rosi). Miembro del tribunal
- 2018. G. David. Aix-Marseille Université (dir. N. Ferré). Miembro del tribunal y evaluadora

### **C.8. Otros**

- Investigadora con Certificación Favorable en Programa I3- Convocatoria 2007
- Premio de Investigación Real Academia Sevillana de Ciencias para Investigadores Jóvenes 2005
- Experiencia docente en asignaturas de Licenciatura, Grado y Máster en titulaciones de Química y Farmacia. Doble Grado en Química e Ingeniería de Materiales y Doble Grado en Farmacia y Óptica y Optometría
- Excelencia docente 2004/05, 2005/06 y evaluación favorable de la actividad docente en U.Sevilla
- Publicaciones docentes: Capítulos en Libro (2) y actividades de Innovación Docente
- Responsable de contrato de personal investigador en el marco del Programa Garantía Juvenil en la U.Sevilla EJ-267. 15/1/2018-31/08/2018.